



TITLE:

量子スピン系におけるグリーン関数法:t-Jモデルの擬スピン表示(修士論文(2007年度))

AUTHOR(S):

山本, 大輔

CITATION:

山本, 大輔. 量子スピン系におけるグリーン関数法:t-Jモデルの擬スピン表示(修士論文(2007年度)). 物性研究 2008, 91(3): 299-331

ISSUE DATE:

2008-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/142702>

RIGHT:

量子スピン系におけるグリーン関数法*

— t - J モデルの擬スピン表示 —

早稲田大学大学院 先進理工学研究科 物理学及応用物理学専攻 栗原研究室
山本 大輔†

目 次

1 はじめに	300
2 擬スピン表示	301
2.1 スピン-1/2 フェルミオンの擬スピン表示	302
2.2 t - J 模型の擬スピン表示	302
3 量子スピン系のグリーン関数法とその適用	304
3.1 グリーン関数とスペクトル定理	304
3.2 イジング模型	306
3.3 ハイゼンベルグ模型	307
3.3.1 平均場理論	308
3.3.2 RPA (Tyablikov) 切断の方法	308
3.3.3 結果の比較	309
3.4 単一イオン異方性	310
4 より複雑な系へのグリーン関数法の適用	312
4.1 横磁場中の容易軸異方性を持つ反強磁性体	312
4.1.1 ハミルトニアンとグリーン関数	313
4.1.2 スピン再配向転移	315
4.2 面内磁場中の容易面異方性を持つ強磁性体	316
4.2.1 通常のグリーン関数の組を用いた方法	317
4.2.2 互いに矛盾する2つの方程式	318
4.2.3 矛盾が生じる理由と手法の改良	321
5 2次元 t - J 模型における反強磁性秩序	323
5.1 副格子磁化	323
5.2 平均場ハミルトニアン	324
5.3 磁化のドーピング量依存性	324
6 おわりに	326

*本稿は、早稲田大学に提出した修士論文を本誌掲載のために和訳し、若干の加筆を行ったものである。

†E-mail: yamamoto@kh.phys.waseda.ac.jp

1 はじめに

銅酸化物における高温超伝導の発見から 20 年余りが経過した。その間実に多数の研究が理論、実験両面からなされてきた。それらすべての研究の流れを挙げることは不可能であるし、既に多くの優れたレビューが出版されているため¹、ここでは詳細を語ることは避ける。近年、Mukuda らにより超伝導と反強磁性の共存に関する興味深い報告が発表された [2] が、その例を持ち出すまでもなく、銅酸化物高温超伝導体の様々な物性において「磁性」が重要な役割を果たしていることはもはや疑うべくもない。本研究では、特に量子スピン系に対するグリーン関数法の適用を中心として局在磁性の解析的な取り扱いに関して議論する。

銅酸化物の諸物性を理論的に考察する際にはハバード模型や t - J 模型がしばしば用いられる。これらの模型は、銅酸化物の物性を決める主要な舞台である CuO_2 面 [図 1(a)] を記述するための最小限の模型であると広く信じられている。図 1(b) に示すようにハバード模型のハミルトニアンは 2 つの項、最近接サイト間における電子の飛び移りエネルギー t の項と同一サイト内の異なるスピンを持つ電子間に働くクーロンエネルギー U の項から成る。この模型は格子状の強く相関する電子の系を記述する最もシンプルな模型として確固たる地位を築いている。しかしながら、 CuO_2 面にドーピングされた正孔は主に O 原子の p 軌道を占有するため、単一バンドのハバード模型では少々単純すぎて銅酸化物の記述に対しては最適とはいえない。

一方 t - J 模型は、単位格子内に Cu 原子の $d_{x^2-y^2}$ 軌道と 2 つの O 原子 p 軌道を持つ 3 バンド模型 [3-5] をもとに導出されるため、より銅酸化物の物性の議論に特化した模型である。正孔ドーピング系では、よく知られているように、ドーピングされた正孔が Cu サイトのスピンと結合しスピンシングレット²を組む。 t - J 模型のハミルトニアンは、このシングレットの実効的な Cu サイト間ホッピング t の項とスピン間の交換相互作用 J の項で構成される [図 1(c)]。ドーピング濃度 $\delta = 0$ で自然に反強磁性体のスピンハミルトニアンに帰着するため、「ドーピングされた反強磁性体」という高温超伝導体の事情を端的に表現しているといえる。この模型では、(電子間の強い相関を反映して) ヒルベルト空間の二重占有が禁じられた領域に電子の運動が制限される。したがって、この二重占有禁止の条件に拘束された電子の演算子は、もはやフェルミオンの持つ反交換関係を満たさず、その解析的な扱いは困難である。そこで我々はまず“拘束された”電子演算子をスピンレスフェルミオンとスピン-1/2 演算子を用いて書き直すことを試みる (第 2 章)。この「擬スピン表示」の t - J

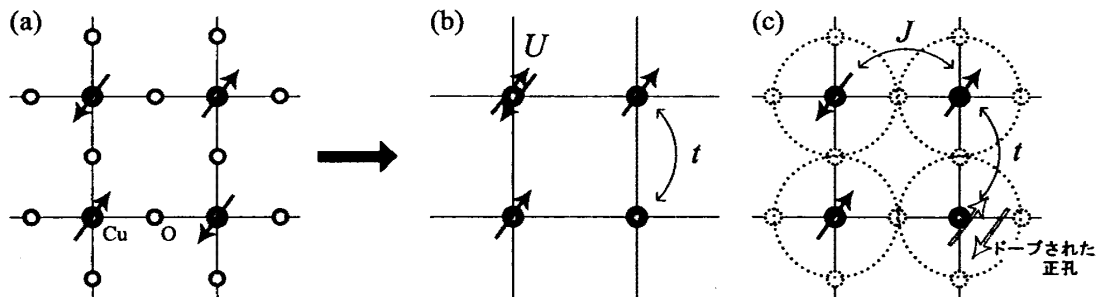


図 1: (a) 銅酸化物高温超伝導体母物質の CuO_2 面の電子構造 (模式図)。明記していないが、O 原子の p 軌道は二重占有されている。正孔 (または電子) のドーピング量によって、様々な興味深い物性が発現する。 CuO_2 面の電子状態はしばしば (b) ハバード模型や (c) t - J 模型などのシンプルな模型を用いて議論される。

¹例えば最近では文献 [1] などがある。

²Zhang-Rice singlet と呼ばれる [3]。

模型は、(外部条件無しで) もとのハミルトニアンと完全に等価であり、後に示すように平均場近似のもとでも「 $\delta = 0$ で反強磁性ハイゼンベルグ模型に帰着する」という性質を保っている。したがって我々の方法は特にハーフフィリング近傍の磁性を考察する上で適しているといえる。磁化の計算にはスピン演算子に対するグリーン関数法を適用する。この方法は量子スピン系の物理を解析的に取り扱う強力な手法である。本稿では擬スピン表示を用いて実際に t - J 模型の反強磁性秩序のドーブ量依存性を計算する (第5章) ことを一応の目的とするが、量子スピン系に対するグリーン関数法の概要とその適用例、さらに近年の我々の研究成果について多くのページ数を割くことにする (第3,4章)。

2 擬スピン表示

t - J 模型は銅酸化物の物性を議論する上で最も基本的な模型の一つである。ここでは便宜上一貫して正孔ドーブの場合に限定して話を進める。³ 電子間の強いクーロン斥力を反映し、この模型では同一サイトに電子が二重占有する状態を禁止する。ハミルトニアンは“拘束された”電子演算子 $\tilde{c}_{i\sigma}$ を用いて以下のように記述される:

$$H_{tJ} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mu \sum_{i,\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma}. \quad (1)$$

スピン演算子 $\mathbf{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$ は $s_i^x = (\tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i\downarrow} + \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i\uparrow})/2$, $s_i^y = (\tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i\downarrow} - \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i\uparrow})/2i$, $s_i^z = (\tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i\uparrow} - \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i\downarrow})/2$ と書くことができ、交換関係 $[s_i^\mu, s_j^\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda} s_i^\lambda \delta_{ij}$ を満たす。 t_{ij} , J_{ij} はサイト i , j 間の飛び移り積分、交換相互作用の大きさをそれぞれ表しており、 μ は系の化学ポテンシャルである。二重占有禁止の条件は

$$\sum_{\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \leq 1 \quad (2)$$

と書くことができるが、この局所拘束条件により t - J 模型の可能な状態は3つの基底

$$|i, \uparrow\rangle, |i, \downarrow\rangle, |i, 0\rangle \quad (3)$$

で構成される。(それぞれスピン \uparrow または \downarrow の電子が1つ占有しているサイトと“空の”サイトに対応する [図1(c)].) 演算子 $\tilde{c}_{i\sigma}$ はこれらの状態に対して以下のように働く:

$$\tilde{c}_{i\sigma} |i, \sigma\rangle = |i, 0\rangle, \quad \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger |i, 0\rangle = |i, \sigma\rangle. \quad (4)$$

通常の電子の生成・消滅演算子とは異なり、 $\tilde{c}_{i\sigma}$ はフェルミ粒子の反交換関係を満たさないため、その解析的取り扱いには注意が必要である。

この問題を扱うときによく用いられる手法の一つとしてはスレーブ粒子平均場法がある [1, 5–12]。例えばスレーブボソン表示では、拘束された電子演算子はボース演算子 b_i とフェルミ演算子 $f_{i\sigma}$ を用いて $\tilde{c}_{i\sigma} \rightarrow b_i^\dagger f_{i\sigma}$ のように変換される。⁴ このような変換を施すと、不等式で与えられていた拘束条件 (2) を等式 $b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1$ に置き換えることができる。しかし実際にはこの局所的な (全サイト数と同数の) 拘束条件を厳密に取り扱うことは困難であり、代わりとして近似的に平均化した大域的拘束条件を用いる。厳密な局所拘束条件のもとではスレーブ粒子を用いた表示はも

³ もちろん電子ドーブの場合も同様の議論ができる。

⁴ b_i は電荷自由度、 $f_{i\sigma}$ はスピン自由度を表している。詳しくは文献 [1, 5–12] 参照。

との t - J ハミルトニアンと等価である。しかしながら、解析的に計算するために用いる平均場の近似により、いくつかの無視できないエラーが生じることになる。(例えば、ハーフフィリング近傍の反強磁性秩序を過大評価してしまうことなどが挙げられる [9–12].) もう一つのアプローチとしては、演算子 $\tilde{c}_{i\sigma}$ をスピンレスフェルミオンとスピン-1/2 演算子を用いて変換する方法がある [13–17]. 以下ではこのアイディアに基づき t - J 模型の「擬スピン表示」を導入する [18, 19].

2.1 スピン-1/2 フェルミオンの擬スピン表示

まずは通常のスピン-1/2 フェルミ演算子 $c_{i\sigma}$ に対する擬スピン表示を考える。反交換関係 $\{h_i, h_j^\dagger\} = \delta_{ij}$, $\{h_i, h_j\} = 0$ を満たす補助演算子 h_i (スピンレスフェルミオン) と交換関係 $[S_i^\mu, S_j^\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda} S_i^\lambda \delta_{ij}$ を満たす補助演算子 $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ (スピン-1/2 演算子) を用いると、フェルミ演算子 $c_{i\sigma}$ は

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &= h_i^\dagger \hat{U}_i(\theta_i - \pi, \varphi_i) S_i^- + e^{i\alpha_i} h_i S_i^- \hat{U}_i^\dagger(\theta_i - \pi, \varphi_i), \\ c_{i\downarrow} &= h_i^\dagger \hat{U}_i(\theta_i, \varphi_i) S_i^+ - e^{i\alpha_i} h_i S_i^+ \hat{U}_i^\dagger(\theta_i, \varphi_i) \end{aligned} \quad (5)$$

と表すことができる。⁵ ここでは昇降演算子 $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ を用いている。また、 $\hat{U}_i(\theta, \varphi) = e^{i\varphi/2} e^{-i\varphi S_i^z} e^{-i\theta S_i^y}$ はスピンの回転演算子である。この演算子の変換に伴い、スピン-1/2 フェルミオンのヒルベルト空間は以下のようにテンソル積空間 $|\cdot\rangle_h \otimes |\cdot\rangle_s$ にマップされる:

$$|i, 0\rangle \rightarrow |i, 1\rangle_h |i, P_e\rangle_s, \quad |i, \uparrow\rangle \rightarrow |i, 0\rangle_h |i, \uparrow\rangle_s, \quad |i, \downarrow\rangle \rightarrow |i, 0\rangle_h |i, \downarrow\rangle_s, \quad |i, \uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |i, 1\rangle_h |i, P_d\rangle_s. \quad (6)$$

ここで“擬スピン”を表す $|i, P_e\rangle_s$ と $|i, P_d\rangle_s$ は、任意の位相因子 α_i とパラメータ θ_i, φ_i を用いて

$$\begin{aligned} |i, P_e\rangle_s &= \cos \frac{\theta_i}{2} |i, \uparrow\rangle_s + e^{i\varphi_i} \sin \frac{\theta_i}{2} |i, \downarrow\rangle_s, \\ |i, P_d\rangle_s &= e^{-i\alpha_i} \left(\sin \frac{\theta_i}{2} |i, \uparrow\rangle_s - e^{i\varphi_i} \cos \frac{\theta_i}{2} |i, \downarrow\rangle_s \right) \end{aligned} \quad (7)$$

と定義する。演算子 \mathbf{S}_i は、 $h_i^\dagger h_i = 0$ のときには (物理的な) 実スピンに対応し、 $h_i^\dagger h_i = 1$ のときはそのサイトが空 ($|i, 0\rangle$) であるか二重占有されている ($|i, \uparrow\downarrow\rangle$) のかを表す擬スピンとして働く。

2.2 t - J 模型の擬スピン表示

二重占有禁止の条件 (2) に拘束された電子の演算子 $\tilde{c}_{i\sigma}$ は通常フェルミ演算子 $c_{i\sigma}$ を用いて

$$\tilde{c}_{i\sigma} = (1 - c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\bar{\sigma}}) c_{i\sigma} \quad (\bar{\sigma} = -\sigma) \quad (8)$$

と表現することができる。これと変換 (5) から、以下の局所的なマッピングが導かれる:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{i\uparrow} &= h_i^\dagger \hat{U}_i(\theta_i - \pi, \varphi_i) S_i^- = h_i^\dagger \left(\cos \frac{\theta_i}{2} S_i^+ S_i^- + e^{i\varphi_i} \sin \frac{\theta_i}{2} S_i^- \right), \\ \tilde{c}_{i\downarrow} &= h_i^\dagger \hat{U}_i(\theta_i, \varphi_i) S_i^+ = h_i^\dagger \left(\cos \frac{\theta_i}{2} S_i^+ + e^{i\varphi_i} \sin \frac{\theta_i}{2} S_i^- S_i^+ \right). \end{aligned} \quad (9)$$

この新しい表示でも、演算子 (9) は式 (6) でマップされた基底に対して、式 (4) で表される関係と同様に作用する。

⁵すなわち反交換関係 $\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$, $\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0$ を満たす

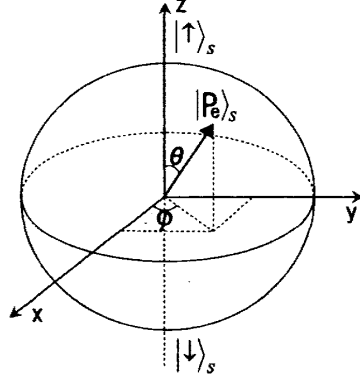


図 2: ブロツホ球による擬スピンの方向の図示.

空のサイト i における擬スピン $|i, P_e\rangle_s$ の方向を表すパラメータ θ_i 及び φ_i の値は任意に決めることができる. 例えば, 文献 [14] の中で Richard らが用いた表示は, 式 (9) で $\theta_i = 0$ と取れば得られる. 文献 [17] でも同様の変換がハバード模型に対する考察に用いられている. また, Feng らはこれと似たような (スピンレスフェルミオンとスピン演算子を用いた) 変換を文献 [20] とそれに続く研究の中で採用している. 彼らの方法は, ちょうど式 (9) において \hat{U}_i を無視した (1 とした) ものに対応しており, 厳密な一対一の変換にはなっていない.⁶

さて, 擬スピン表示 (9) を用いると実スピン演算子 s_i , “擬スピン演算子” $\mathbf{p}_i = (p_i^x, p_i^y, p_i^z)$, サイトあたりの電子数演算子 $\sum_{\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{i\sigma}$ はそれぞれ

$$s_i = (1 - h_i^{\dagger} h_i) S_i, \quad (10)$$

$$\mathbf{p}_i = h_i^{\dagger} h_i S_i, \quad (11)$$

$$\sum_{\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{i\sigma} = 1 - h_i^{\dagger} h_i \leq 1 \quad (12)$$

と表せる. 関係式 (12) は, この表示が外部的な拘束条件無しで自然に二重占有を排除していること,⁷ また, $\delta = \langle h_i^{\dagger} h_i \rangle$ を正孔ドープ濃度と見なせることを表している. さらに t - J ハミルトニアン (1) は演算子 h_i と \mathbf{S}_i を用いて

$$\begin{aligned} H_{\text{PR}} = & - \sum_{i,j} \left[t_{ij} h_i h_j^{\dagger} \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{4} + \mathbf{n} \cdot \left(\frac{1}{2} \mathbf{S}_i + \frac{1}{2} \mathbf{S}_j + i \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \right) \right\} \right] \\ & - \mu \sum_i h_i^{\dagger} h_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} h_i h_i^{\dagger} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j h_j h_j^{\dagger} \end{aligned} \quad (13)$$

と書き換えることができる. ここでは簡単のためパラメータ θ_i, φ_i はサイトに依らず一定である ($\theta_i = \theta, \varphi_i = \varphi$) とした.⁸ $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ は擬スピン $|i, P_e\rangle_s$ の方向の単位ベクトルである [図 2]. 交換相互作用 J_{ij} の項は実スピンにのみ働く. Loos ら [16] は t - J ハミルトニ

⁶ 実際, \hat{U}_i が存在しないことで不都合なことが起こる. 彼らの変換を用いて, 例えば “実” スピンの上昇演算子を変換すると $s_i^{\dagger} = \tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger} \tilde{c}_{i\downarrow} \rightarrow S_i^{\dagger} h_i^{\dagger} h_i S_i^{\dagger} = 0$ というように演算子レベルで 0 になってしまう.

⁷ この点が前述のスレーブ粒子法と大きく異なる.

⁸ すなわち, すべての (空の) サイトの擬スピンを同じ方向にとる.

アンの持つ時間反転対称性を保つようにパラメータ θ , φ の選び方に制限を加えた。しかし、ここではそのような制限は採用しない。⁹ 実際、第5章で述べるように我々の得る結果は θ と φ の値に依存しない。擬スピン表示のハミルトニアン (13) は、外部的な拘束条件無しで、もとの t - J ハミルトニアン (1) と完全に等価である。

3 量子スピン系のグリーン関数法とその適用

銅酸化物高温超伝導体の母物質は反強磁性秩序を持った絶縁体であり、スピン演算子を用いた2次元ハイゼンベルグ模型で記述できる。前章で既に述べたように、正孔（または電子）をドーブしたときの電子状態を記述する t - J 模型も2つの補助場、スピンレスフェルミオンとスピン-1/2 演算子を用いて書くことができる。これらのハミルトニアンを解析する上ではスピン演算子の取り扱い方が重要になる。そこでこの章では、量子スピン系における（スピン）グリーン関数を用いた解析的計算方法について基礎的な例題を交えて概説する。この方法を用いる際には、特別な場合を除いて、高次のグリーン関数に対する運動方程式の無限階層構造を断ち切るために（連立方程式を閉じるために）何らかの「切断」近似を施すことが要求される。

Tyablikov [21] により導入された1次の（最低次の）切断近似は、乱雑位相近似（RPA）または“Tyablikov decoupling”と呼ばれ、非常にシンプルながらも効果的な方法である。このTyablikovの手法をさらに改良するために、これまでにたくさんの試みがなされ様々な新しい切断の方法（例えば、Callen decoupling [22], Tahir-Kheliの方法 [23], “修正版”Callen decoupling [24,25], Oguchiの変分理論 [26] など）が提案されてきた。それにもかかわらずRPAの切断方法はいまだに最もシンプルで最も信頼できる方法の一つである。¹⁰ より高次の近似、例えばKondoとYamaji [28] が導入した“2次”の切断近似などを用いることで、より定量的な結果を得ることができると期待される。この方法では、RPAのときには切断した高次グリーン関数に対しさらにもう一度運動方程式を立て、その結果生まれるもう1つ高次のグリーン関数に対して切断近似を行う。その際に“vertex parameter”と呼ばれる量を導入し、その値も含めて物理量を自己無撞着に決める。Kondoらはこの方法を1次元の等方的なハイゼンベルグ模型に対して適用したが、その後、ShimaharaとTakada [29] により2次元の場合に拡張され、最近でもJungerら [30] やAntsyginaら [31] により磁場が存在する場合などへの拡張が考察されている。しかしながら、例えばvertex parameterの値を決める条件の選び方などいくつかの問題が残っており、この方法がより複雑な系の場合に適応可能かどうかはこれからの研究の発展が待たれる。したがってRPAの切断法は非常にシンプルな手法ではあるものの、近年でも量子スピン系の様々な物性の議論に際し多くの論文の中で用いられている。

3.1 グリーン関数とスペクトル定理

まずグリーン関数法の基本的な流れについて概説する。¹¹ 遅延“交換”グリーン関数 ($\eta = -1$) と“反交換”グリーン関数 ($\eta = +1$) を

$$\begin{aligned} G_{\eta}^{AB}(t-t') &= \langle \langle A(t-t'); B \rangle \rangle_{\eta} \\ &= -i\Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

⁹Loosらの議論は演算子 S_i が実スピン s_i と同様の時間反転変換を受けるという仮定の上で行われている。

¹⁰例えば、文献 [27] にあるRPAとCallen decouplingそれぞれによる計算結果と量子モンテカルロ法による数値解との比較を見よ。

¹¹詳細は文献 [27] などを参照のこと。

で定義する. $\Theta(t)$ はステップ関数

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0), \\ 0 & (t < 0) \end{cases} \quad (15)$$

である. $[A, B]_{-1} = [A, B]$ と $[A, B]_{+1} = \{A, B\}$ はそれぞれ演算子 A と B に関する交換関係と反交換関係であり, $\langle A \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H} A) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$ は A の期待値 (アンサンブル平均) を表している.¹² よく知られているようにグリーン関数は以下の運動方程式を満たす:

$$\omega G_{\eta}^{AB}(\omega) = \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\eta, \omega}. \quad (16)$$

一般的にこの式の右辺は高次のグリーン関数を含むため, 式を閉じるために何らかの切断近似が用いられる. 方程式を解いてグリーン関数を得ることができれば物理量の期待値, 相関関数はスペクトル定理

$$\langle AB \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{G_{\eta}^{AB}(\omega + i\delta) - G_{\eta}^{AB}(\omega - i\delta)}{1 + \eta e^{-\beta\omega}} + \frac{1 - \eta}{4} C_{-\eta}^{AB}, \quad (17)$$

$$\langle BA \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{G_{\eta}^{AB}(\omega + i\delta) - G_{\eta}^{AB}(\omega - i\delta)}{e^{\beta\omega} + \eta} + \frac{1 - \eta}{4} C_{-\eta}^{AB}, \quad (18)$$

$$C_{\eta}^{AB} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G_{\eta}^{AB} \quad (19)$$

を用いて計算することができる. 解析的な性質として交換グリーン関数は $\omega = 0$ に極を持たないことが知られている.¹³ すなわち

$$C_{-1}^{AB} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G_{-1}^{AB} = 0 \quad (20)$$

である. もし反交換グリーン関数が $\omega = 0$ に極を持つときは, 式 (17) と (18) の中で $C_{+1}^{AB}/2$ の項が重要となる. また, 補足的ではあるが, 特にスピン系に対する計算では式 (17) と (18) を $\eta = -1$ として以下の形に変形した方が使いやすい場合が多い:

$$\langle \{A, B\} \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (G_{-1}^{AB}(\omega + i\delta) - G_{-1}^{AB}(\omega - i\delta)) \coth \frac{\beta\omega}{2} + C_{+1}^{AB}, \quad (21)$$

$$\langle [A, B] \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (G_{-1}^{AB}(\omega + i\delta) - G_{-1}^{AB}(\omega - i\delta)). \quad (22)$$

一般的には式 (21) が物理量を決める自己無撞着な方程式として働き, 式 (22) は単純な恒等式になってしまい情報を持たない.

以下ではいくつかの比較的シンプルな場合を例に取り, 実際にグリーン関数法を適用してみる. これらの例では反交換グリーン関数は $\omega = 0$ に極を持たない. そこでこの章内では交換グリーン関数のみを取り扱うことにし, 添え字 “-1” を落として書くことにする.

¹² 通常の記法 $\beta = 1/T$ を用いている.

¹³ 文献 [27] や [32] などに詳しい説明がある.

3.2 イジング模型

グリーン関数の運動方程式を近似無しで厳密に解くことができる場合の例として、 d 次元の超立方格子上のスピン-1/2 イジング模型を考える。ハミルトニアンは

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z, \quad (23)$$

で与えられる。 h は印加された磁場を表している。ここでは最近接のカップリングのみを考えることにする：

$$J_{ij} = \begin{cases} J & (|i-j|=1), \\ 0 & (\text{その他}). \end{cases} \quad (24)$$

グリーン関数に対する運動方程式を立てるために、まずは基本となる演算子と H の交換関係を計算する。スピンの昇降演算子 $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ の満たす交換関係

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij}, \quad [S_i^z, S_j^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij}. \quad (25)$$

を用いると、

$$[S_i^+, H] = \sum_k J_{ik} S_i^+ S_k^z + h S_i^+ = J \xi_i S_i^+ + h S_i^+ \quad (26)$$

を得る。ただし $\xi_i = \sum_k J_{ik} S_k^z / J$ とした。この式の右辺は高次の項 $J \xi_i S_i^+$ を含んでいるため、運動方程式の階層構造が閉じるまでこの操作を続ける必要がある。交換関係 (25) をもとに同様に計算すると、演算子 $\xi_i^n S_i^+$ に対して

$$[\xi_i^n S_i^+, H] = J \xi_i^{n+1} S_i^+ + h \xi_i^n S_i^+ \quad (27)$$

という漸化式を得る。それぞれの方程式 ($n = 0, 1, \dots$) は、左辺の $\xi_i^n S_i^+$ に対してより高次の項 $\xi_i^{n+1} S_i^+$ を右辺に含んでいるが、幸運なことに今の場合はこの無限層構造を近似無しで断ち切ることができる。スピン-1/2 演算子の性質 $(S_i^z)^2 = 1/4$ を用いると¹⁴関係式

$$\xi_i^{2d+1} = \sum_{m=0}^{2d} \alpha_m^{(d)} \xi_i^m \quad (28)$$

を導くことができる。係数 $\alpha_m^{(d)}$ は次元 d によって異なり、例えば

$$\xi_i^{2d+1} = \begin{cases} \xi_i & (d=1), \\ 5\xi_i^3 - 4\xi_i & (d=2) \end{cases} \quad (29)$$

となる。これを用いることで漸化式 (27) が閉じた式になる。

交換グリーン関数を

$$\mathbf{G}_{ij} = \langle \langle \Psi_i; \Psi_j^\dagger \rangle \rangle, \quad \Psi_i = \begin{pmatrix} S_i^+ \\ \xi_i S_i^+ \\ \vdots \\ \xi_i^{2d} S_i^+ \end{pmatrix}. \quad (30)$$

¹⁴一般的にはスピン S のとき $\prod_{r=-S}^S (S_i^z + r) = 0$ と書ける。

で定義すると, $(2d+1) \times (2d+1)$ 行列 \mathbf{G}_{ij} に対する運動方程式は

$$\omega \mathbf{G}_{ij}(\omega) = \langle [\Psi_i, \Psi_j^\dagger] \rangle + \langle \langle [\Psi_i, H]; \Psi_j^\dagger \rangle \rangle_\omega \quad (31)$$

となる. フーリエ変換

$$\mathbf{G}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \mathbf{G}_{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (32)$$

$$\Lambda_{\mathbf{q},-1} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle [\Psi_i, \Psi_j^\dagger] \rangle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (33)$$

(N は格子点の数) を行うとグリーン関数に対する表式

$$\mathbf{G}_{\mathbf{q}} = (\omega \mathbf{1} - \Gamma)^{-1} \Lambda_{\mathbf{q},-1} \quad (34)$$

を得る. 行列 Γ は式 (27), (29) より, $d=1, d=2$ の場合は

$$\Gamma = \begin{pmatrix} h & J & 0 \\ 0 & h & J \\ 0 & J & h \end{pmatrix} \quad (d=1), \quad \Gamma = \begin{pmatrix} h & J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & J \\ 0 & -4J & 0 & 5J & h \end{pmatrix} \quad (d=2) \quad (35)$$

となる. グリーン関数行列 $\mathbf{G}_{\mathbf{q}}$ のそれぞれの成分に対してスペクトル定理を適用することで, 物理量の期待値, 相関関数などを計算することができる.

ここでは, グリーン関数法を用いてイジング模型を厳密に解く手順を示した. 計算の結果を含むより詳細な議論は文献 [33] でなされている.

3.3 ハイゼンベルグ模型

次に, スピン $S=1/2$ の磁場中強磁性体の磁化の振る舞いをグリーン関数法を用いて計算してみる. 模型としてハミルトニアン

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) - h \sum_i S_i^z \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^- S_j^+ + \Delta S_i^z S_j^z) - h \sum_i S_i^z \end{aligned} \quad (36)$$

を考える. $J_{ij} > 0$, h はそれぞれ最近接交換相互作用と印加された磁場の大きさを表している. ここでは z 軸方向に容易軸異方性 $\Delta \geq 1$ を持つ場合を考える. ($\Delta=1$ のときは等方的なハイゼンベルグ模型に対応している.)

この系に対しては式 (26) の代わりに

$$[S_i^+, H] = - \sum_k J_{ik} (S_i^z S_k^+ - \Delta S_i^+ S_k^z) + h S_i^+ \quad (37)$$

を得る. よってグリーン関数 $G_{ij} = \langle \langle S_i^+; S_j^- \rangle \rangle$ に対する運動方程式は

$$\omega G_{ij}(\omega) = \langle [S_i^+, S_j^-] \rangle - \sum_k J_{ik} \left(\langle \langle S_i^z S_k^+; S_j^- \rangle \rangle_\omega - \Delta \langle \langle S_i^+ S_k^z; S_j^- \rangle \rangle_\omega \right) + h G_{ij}(\omega) \quad (38)$$

となる。これが“1段階目”の運動方程式である。さらに、右辺の高次グリーン関数に対して“2段階目”の運動方程式を立てていくこともできる。しかし、この場合はイジング模型のときとは異なり、より高次のグリーン関数に対する運動方程式の立式を何度繰り返していても連立方程式が閉じることはない。そこで、この無限階層構造を断ち切るためには何らかの近似的取り扱いが必要となる。

3.3.1 平均場理論

平均場理論 (MFT) の枠組みでは、ハミルトニアンを構成する演算子を平均値とそこからの揺らぎの部分に分割し、2つのスピン演算子の積を

$$\begin{aligned} S_i^\mu S_j^\nu &= (\langle S_i^\mu \rangle + \delta S_i^\mu)(\langle S_j^\nu \rangle + \delta S_j^\nu) \\ &\approx \langle S_i^\mu \rangle \langle S_j^\nu \rangle + \langle S_i^\mu \rangle \delta S_j^\nu + \langle S_j^\nu \rangle \delta S_i^\mu \\ &= \langle S_i^\mu \rangle \langle S_j^\nu \rangle + \langle S_j^\nu \rangle S_i^\mu - \langle S_i^\mu \rangle \langle S_j^\nu \rangle \end{aligned} \quad (39)$$

というように近似する。この平均場近似は問題を解析的に取り扱うための最も簡便な方法である。強磁性的な系の場合、磁化はサイト i に依存しない形で $\langle S_i^z \rangle \equiv m$ と定義することができる。平均場近似のもとでハミルトニアンを書きなおすと

$$H^{(\text{MFT})} = -(h + zJ\Delta m) \sum_i S_i^z \quad (40)$$

となる。ここで z は最近接格子点の数である。(例えば1次元鎖では $z = 2$, 2次元正方格子では $z = 4$ である。) この近似的な1体問題のハミルトニアンに対する分配関数を書き下すことは容易であるが、ここではグリーン関数法の枠組みを用いて計算してみる。運動方程式は

$$\omega G_{ij}(\omega) = 2m\delta_{ij} + (h + zJ\Delta m)G_{ij}(\omega) \quad (41)$$

となり、ただちに

$$G_{\mathbf{q}} = \frac{2m}{\omega - \omega^{(\text{MFT})}} \quad (42)$$

を得る。ここでグリーン関数の極は

$$\omega^{(\text{MFT})} = h + zJ\Delta m \quad (43)$$

で与えられる。

3.3.2 RPA (Tyablikov) 切断の方法

MFT ではハミルトニアンに対して近似を施したが、運動方程式の階層構造のいずれかの段階で近似を行えば、より定量的な結果を得ることができると期待される。

RPA (Tyablikov) 切断 [21] と呼ばれる方法は非常にシンプルかつ有用である。この方法では運動方程式の階層構造の1段階目、式 (38) で、以下のように高次のグリーン関数を切断近似する:

$$\langle\langle S_i^z S_k^+; S_j^- \rangle\rangle \approx \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_k^+; S_j^- \rangle\rangle = mG_{kj} \quad (i \neq k). \quad (44)$$

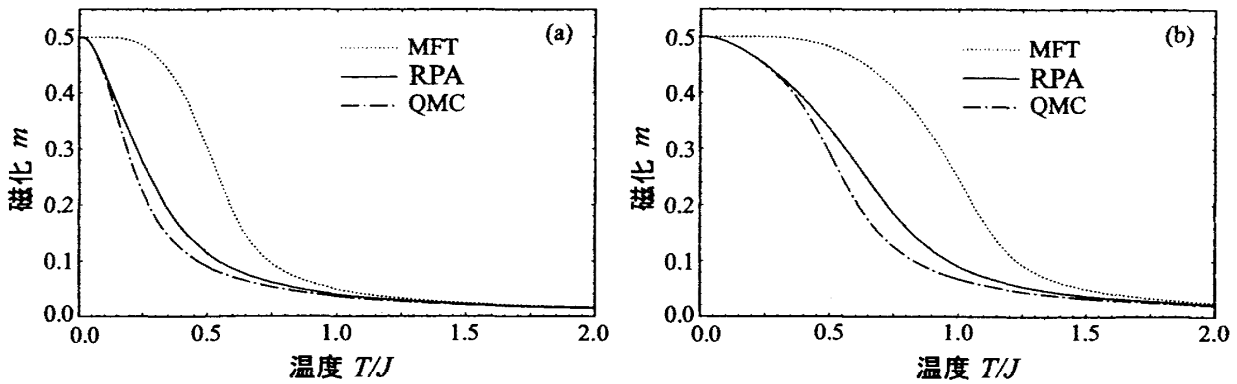


図 3: 磁場 $h/J = 0.1$ での等方的 ($\Delta = 1$) ハイゼンベルグ模型における磁化の温度依存性. (a) 1次元鎖の場合. (b) 正方格子の場合. QMC の数値解のエラーバーは線の太さよりも小さい.

式 (38) と (44) から

$$G_{\mathbf{q}} = \frac{2m}{\omega - \omega_{\mathbf{q}}^{(\text{RPA})}} \quad (45)$$

を得る. このグリーン関数の極は

$$\omega_{\mathbf{q}}^{(\text{RPA})} = h + zJm(\Delta - \gamma_{\mathbf{q}}) \quad (46)$$

で与えられる. フーリエ因子 $\gamma_{\mathbf{q}}$ は 1 次元鎖のときは $\gamma_{\mathbf{q}} = \cos q_x$, 正方格子では $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ である. (格子定数を 1 としている.)

3.3.3 結果の比較

交換グリーン関数 (45) をスペクトル定理 (21) に代入すると,

$$\Lambda_{\mathbf{q},+1} = 2m \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{q}}^{(\text{RPA})}}{2} \quad (47)$$

を得る. ここで $\Lambda_{\mathbf{q},+1}$ は $\langle \{S_i^+, S_j^-\} \rangle$ をフーリエ変換したものである. $\omega_{\mathbf{q}}^{(\text{RPA})}$ を $\omega_{\mathbf{q}}^{(\text{MFT})}$ で置き換えると MFT の場合の表式が得られる. さらにスピン-1/2 演算子の性質 $\{S_i^+, S_i^-\} = 1$ を用いると, それぞれの場合に対して方程式

$$\frac{1}{2} = m \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{q}}^{(\text{MFT})}}{2} \quad (\text{MFT}), \quad (48)$$

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} m \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{q}}^{(\text{RPA})}}{2} \quad (\text{RPA}) \quad (49)$$

を導くことができる.¹⁵ これらの式を解くことで MFT, RPA それぞれの方法での磁化 m を算出することができる. 図 3 は等方的な場合 ($\Delta = 1$) の磁化の温度依存性である. 比較のために量子モンテカルロ法 (QMC) [34–38] による数値解とともに図示している. 明らかに, MFT に比べて RPA の方が全領域にわたって良い近似になっていることが見て取れる. その差は, 図 4 のように様々な Δ の値に対しての磁化を T/J^z ($J^z = J\Delta$) の関数として図示するとよりはっきり見える.

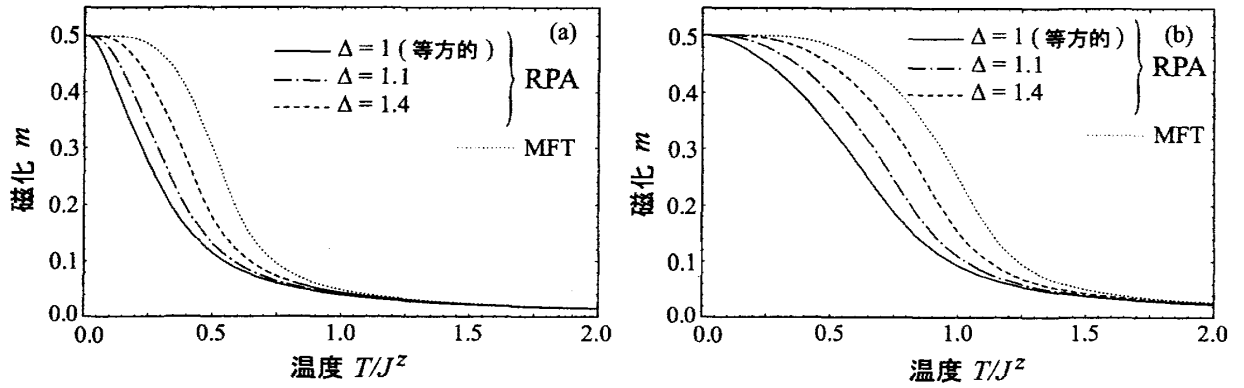


図 4: T/J^z ($J^z = J\Delta$) の関数としてみた磁化の値 (磁場 $h/J^z = 0.1$) . (a) 1次元鎖の場合. (b) 正方格子の場合.

MFT の枠組みではスピントリップ項 $S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y$ の影響を取り入れることができないため、磁化は T/J^z と h/J^z の値のみに依存する. 一方 RPA の方法では、この項の引き起こす量子揺らぎの効果を取り入れられるため、磁化が抑制されてその値は MFT のものより小さくなる. また、容易軸異方性 Δ が大きくなるに従い相対的にスピントリップ項の影響が小さくなるため、RPA の磁化の値は MFT のものに近付いていく.

上で見たように、RPA 切断の方法は広い温度領域にわたって非常に有効な理論であるが、 $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ のような相関関数を式 (45) のグリーン関数から単純に直接求めることはできない. そこでいくつかの先行研究では、サイトあたりの内部エネルギー $\langle H \rangle / N = -\frac{1}{2} J (c_1^{+} + c_1^{z^2}) / 2 - h m$ ($c_{i-j}^{\mu\nu} = \langle S_i^{\mu} S_j^{\nu} \rangle$) を求める際に以下のような関係式を用いている:¹⁶

$$\langle S_i^- [S_i^+, H] \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega (G_{\mathbf{q}}(\omega + i\delta) - G_{\mathbf{q}}(\omega - i\delta))}{e^{\beta\omega} - 1}. \quad (50)$$

3.4 単一イオン異方性

これまで簡単のためにスピン $S = 1/2$ の場合に限って議論してきた. $S > 1/2$ のときは、単一イオン異方性の項がハミルトニアンに加わることがある. このような異方性がない式 (36) の系に対しては、既に Callen によって一般のスピン S に対する RPA での磁化の表式が求められている [22].

そこで以下では単一イオン異方性を含む系を考える:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^- S_j^+ + \Delta S_i^z S_j^z) - D \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z. \quad (51)$$

ここで $D > 0$ は容易軸型の単一イオン異方性の大きさを表している. この場合は

$$[S_i^+, H] = - \sum_k J_{ik} (S_i^z S_k^+ - \Delta S_i^+ S_k^z) + 2D S_i^z S_i^+ + (h - D) S_i^+ \quad (52)$$

¹⁵ 波数 \mathbf{q} の和はブリルアンゾーン内で取る.

¹⁶ 詳細については文献 [27] などを参照のこと.

となり, $G_{ij} = \langle\langle S_i^+; S_j^- \rangle\rangle$ に対する運動方程式は

$$\begin{aligned} \omega G_{ij}(\omega) = & \langle\langle S_i^+, S_j^- \rangle\rangle - \sum_k J_{ik} \left(\langle\langle S_i^z S_k^+; S_j^- \rangle\rangle_\omega - \Delta \langle\langle S_i^+ S_k^z; S_j^- \rangle\rangle_\omega \right) \\ & + 2D \langle\langle S_i^z S_i^+; S_j^- \rangle\rangle_\omega + (h - D) G_{ij}(\omega) \end{aligned} \quad (53)$$

と書くことができる. この式には $\langle\langle S_i^z S_k^+; S_j^- \rangle\rangle$ ($i \neq k$) に加えて, もうひとつ異なるタイプの高次グリーン関数 $\langle\langle S_i^z S_i^+; S_j^- \rangle\rangle$ が含まれている. Anderson と Callen はこの項に対し RPA 切断とは異なる形の切断近似を導入した [39]. この “Anderson-Callen decoupling” の方法は, 異方性が小さいときには良い結果を与えることが確かめられた [40].

しかし以下に述べるように, この単一イオン異方性の項は新たな (RPA 以外の) 切断近似を用いずに取り扱うことができる.¹⁷ まず, 以下のようにグリーン関数を定義する:

$$G_{ij}^{(n)} = \langle\langle \Omega_i^{(n)} S_i^+; S_j^- \rangle\rangle, \quad (54)$$

$$\Omega_i^{(n)} = \begin{cases} 1 & (n=0); \\ \prod_{r=0}^{n-1} (S_i^z - S + r) & (n \geq 1). \end{cases} \quad (55)$$

この $G_{ij}^{(n)}$ に対する運動方程式は

$$\begin{aligned} \omega G_{ij}^{(n)}(\omega) = & \Lambda_{-1}^{(n)} \delta_{ij} - \sum_k J_{ik} \left(\frac{1}{2} \langle\langle \hat{\Lambda}_{i,-1}^{(n)} S_k^+; S_j^- \rangle\rangle_\omega - \Delta \langle\langle \Omega_i^{(n)} S_i^+ S_k^z; S_j^- \rangle\rangle_\omega \right) \\ & + 2D G_{ij}^{(n+1)}(\omega) + \{h + (2S - 2n - 1)D\} G_{ij}^{(n)}(\omega) \end{aligned} \quad (56)$$

と書ける. ただし $\hat{\Lambda}_{i,-1}^{(n)} = [\Omega_i^{(n)} S_i^+, S_i^-]$, $\Lambda_{-1}^{(n)} = \langle\hat{\Lambda}_{i,-1}^{(n)}\rangle$ である. ここで $\langle\langle S_i^z S_k^+; S_j^- \rangle\rangle$ ($i \neq k$) のタイプのグリーン関数には, 第 3.3.2 節と同様に RPA の切断

$$\langle\langle \hat{\Lambda}_{i,-1}^{(n)} S_k^+; S_j^- \rangle\rangle \approx \Lambda_{-1}^{(n)} G_{kj}^{(0)}, \quad \langle\langle \Omega_i^{(n)} S_i^+ S_k^z; S_j^- \rangle\rangle \approx m G_{ij}^{(n)} \quad (i \neq k) \quad (57)$$

を施す. フーリエ変換して式を整理すると以下の漸化式を得る:

$$2D G_{\mathbf{q}}^{(n+1)} = (\omega - \omega_n) G_{\mathbf{q}}^{(n)} - \Lambda_{-1}^{(n)} \left(1 - \frac{1}{2} z J \gamma_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}^{(0)} \right). \quad (58)$$

ここで $\omega_n = h + (2S - 2n - 1)D + zJ\Delta m$ である. また, スピン演算子の満たす関係式 $\Omega_i^{(2S)} S_i^+ = \prod_{p=-S}^{S-1} (S_i^z + p) S_i^+ = 0$ を用いると¹⁸, ただちに

$$G_{\mathbf{q}}^{(2S)} = 0. \quad (59)$$

を得る. よって漸化式 (58) は簡単に解け, グリーン関数に対する表式

$$G_{\mathbf{q}}^{(n)}(\omega) = \frac{\Sigma^{(n)}(\omega)}{1 + \frac{1}{2} z J \Sigma^{(0)}(\omega) \gamma_{\mathbf{q}}} \quad (n = 0, 1, \dots, 2S - 1), \quad (60)$$

¹⁷ 文献 [41] も参照のこと.

¹⁸ スピン演算子の交換関係 $[S_i^z, S_j^+] = S_i^+ \delta_{ij}$ と性質 $\prod_{r=-S}^S (S_i^z + r) = 0$ より $0 = [\Omega_i^{(2S+1)}, S_i^+] = (2S+1) \Omega_i^{(2S)} S_i^+$ である.

$$\Sigma^{(n)}(\omega) = \sum_{j=n}^{2S-1} \prod_{i=n}^j \frac{(2D)^{j-n}}{\omega - \omega_i} \Lambda_{-1}^{(j)} \quad (61)$$

を得る. 単一イオン異方性の項が定数になる $S = 1/2$ の場合は, 期待通り, 上記の表式は式 (45) と完全に一致する. $S > 1/2$ の場合の例としてスピン $S = 1$ の場合を考え, 得られたグリーン関数から磁化 m を求める式を導出してみる. 式 (60) より,

$$\begin{pmatrix} G_{\mathbf{q}}^{(0)} \\ G_{\mathbf{q}}^{(1)} \end{pmatrix} = \frac{1}{(\omega - \omega_{\mathbf{q},+})(\omega - \omega_{\mathbf{q},-})} \begin{pmatrix} (\omega - \omega_1)\Lambda_{-1}^{(0)} + 2D\Lambda_{-1}^{(1)} \\ (\omega - \omega_0)\Lambda_{-1}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (62)$$

$$\omega_{\mathbf{q},\pm} = \frac{\omega_0 + \omega_1 - \frac{1}{2}zJ\Lambda_{-1}^{(0)}\gamma_{\mathbf{q}} \pm \sqrt{\left(2D - \frac{1}{2}zJ\Lambda_{-1}^{(0)}\gamma_{\mathbf{q}}\right)^2 - 4zJD\Lambda_{-1}^{(1)}\gamma_{\mathbf{q}}}}{2}. \quad (63)$$

と書ける. また, スピン演算子の交換関係 (25) と関係式

$$S_i^{\mp} S_i^{\pm} = S(S+1) \mp S_i^z - (S_i^z)^2, \quad (64)$$

を用いると, $\Lambda_{-1}^{(0)} = 2m$ 及び $\Lambda_{-1}^{(1)} = -2 - m + 3\langle (S_i^z)^2 \rangle$ を得る. ここで式 (62) にスペクトル定理 (21) を適用し, 式 (64) と $\prod_{r=-S}^S (S_i^z + r) = 0$ を用いると, 以下の m と $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ を決める連立方程式を導くことができる:

$$\begin{pmatrix} 4 - 2\langle (S_i^z)^2 \rangle \\ -2 + m + \langle (S_i^z)^2 \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, \alpha = \pm} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q},\alpha} - \omega_{\mathbf{q},\bar{\alpha}}} \begin{pmatrix} (\omega_{\mathbf{q},\alpha} - \omega_1)\Lambda_{-1}^{(0)} + 2D\Lambda_{-1}^{(1)} \\ (\omega_{\mathbf{q},\alpha} - \omega_0)\Lambda_{-1}^{(1)} \end{pmatrix} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q},\alpha}}{2}. \quad (65)$$

ただし $\bar{\alpha} = -\alpha$ である.

4 より複雑な系へのグリーン関数法の適用

量子スピン系において, 印加した磁場によって引き起こされる様々な現象が理論・実験の両面から多くの研究の対象となってきた. 例えば, 1 軸異方性を持つ反強磁性体において磁化容易軸に沿った方向に磁場をかけると, その大きさ (と温度) に応じて様々な相 (反強磁性相, スピントロップ相, 常磁性相など) が多重臨界点を伴って現れる [42–46]. また, 磁化容易軸に垂直な磁場を印加した場合に起きるスピン再配向転移なども多くの文献の中で興味の対象になっている [18, 27, 47–58].

この章では, これらの比較的複雑な系, 特に磁化の方向を中心とした回転対称性を持たない系¹⁹に対するグリーン関数法の適用に関して議論する. 上で挙げた文献の中でも, 解析的な計算のためにしばしば RPA 切断を伴ったグリーン関数法が用いられている. しかしながら, 後に述べるように, これらの系に RPA 切断の方法を用いるときには特別な注意を払わなければならない.

4.1 横磁場中の容易軸異方性を持つ反強磁性体

反強磁性体の磁氣的性質は, 特に高温超伝導の発見以降大きな注目を集め, これまでに様々な観点から研究がなされてきた [59–63]. ここでは, その中でも磁化容易軸に垂直な磁場を加えたと

¹⁹ 第 3 章で例に挙げたいくつかの系は磁化の方向 (z 軸) に垂直な面 (xy 面) では異方性がないため, z 軸を中心として回転対称である.

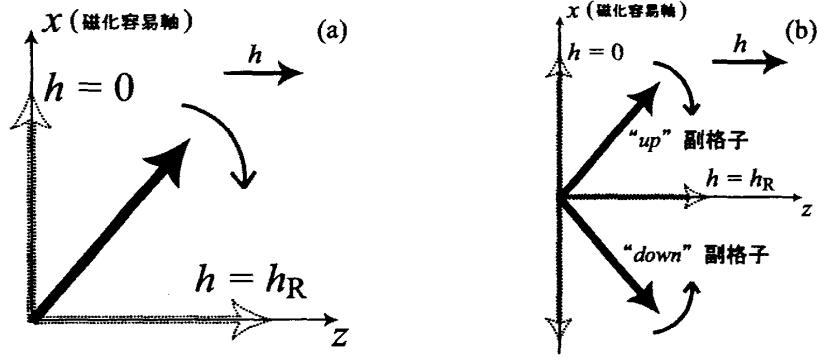


図 5: スピン再配向の模式図. (a) 強磁性的相互作用の場合. (b) 反強磁性的相互作用の場合.

きに起こるスピン再配向転移に注目し、この系に対するグリーン関数法を用いた取り扱いについて言及する。2次元異方的反強磁性体における磁化の横磁場依存性は、文献 [52] と [27] の中で既にグリーン関数法を用いて解析されている。それぞれ前者は回転座標系で、後者は静止座標系で計算された。本来はどちらで計算しても等しい結果を得るはずであるが、2つの計算結果には著しい差異がある。このことに関しては、文献 [27] の中で Fröbrich と Kuntz により詳細に議論されているのでここでは触れない。以下では、後者の静止座標系での方法を用いて、横磁場中の容易軸異方性を持つ反強磁性体へのグリーン関数法の適用に関して議論する。

4.1.1 ハミルトニアンとグリーン関数

ここでは以下のハミルトニアンで記述される系を取り扱う。²⁰

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\Delta S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - h \sum_i S_i^z \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left(\frac{\Delta+1}{4} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + \frac{\Delta-1}{4} (S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-) + S_i^z S_j^z \right) \\
 &\quad - h \sum_i S_i^z.
 \end{aligned} \tag{66}$$

2次元正方格子上の反強磁性的な交換相互作用 $J_{ij} > 0$ を持つスピン $S = 1/2$ の系を考え、簡単のために最近接サイトからの寄与のみを考慮することにする。この系の振る舞いは異方性のパラメータ Δ の値に強く依存するが、ここでは容易軸異方性の場合 ($\Delta \geq 1$) について議論する。この場合、スピンは x 軸の方向に向きたがるため、(磁場 h が加えられていなければ) x 軸方向に配向した反強磁性秩序が生じる。この状態で横磁場 h を加えていくと、図 5 で示すようなスピン再配向転移が起きる。

交換 ($\eta = -1$) グリーン関数と反交換 ($\eta = +1$) グリーン関数は

$$\begin{aligned}
 G_{ij,\eta}^{\mu-}(t-t') &= -i\Theta(t-t') \langle [S_i^\mu(t), S_j^-(t')] \rangle_\eta \\
 &= \langle \langle S_i^\mu; S_j^- \rangle \rangle_\eta; \quad \mu = +, -, z
 \end{aligned} \tag{67}$$

のように定義する。すると運動方程式は

$$\omega G_{ij,\eta}^{\mu-}(\omega) = \langle [S_i^\mu, S_j^-] \rangle_\eta + \langle \langle [S_i^\mu, H]; S_j^- \rangle \rangle_{\eta,\omega}, \tag{68}$$

²⁰ 文献 [18, 27] もあわせて参照のこと。

$$[S_i^\pm, H] = \pm \sum_k J_{ik} \left(\frac{\Delta+1}{2} S_i^z S_k^\pm + \frac{\Delta-1}{2} S_i^\pm S_k^\mp - S_i^\pm S_k^\pm \right) \pm h S_i^\pm, \quad (69)$$

$$[S_i^z, H] = \sum_k J_{ik} \left(\frac{\Delta+1}{4} (S_i^+ S_k^- - S_i^- S_k^+) + \frac{\Delta-1}{4} (S_i^+ S_k^+ - S_i^- S_k^-) \right) \quad (70)$$

となる。ここで高次のグリーン関数に対して（一般化された）RPA 切断

$$\langle\langle S_i^\mu S_k^\nu; S_j^- \rangle\rangle_\eta \approx \langle S_i^\mu \rangle \langle\langle S_k^\nu; S_j^- \rangle\rangle_\eta + \langle S_k^\nu \rangle \langle\langle S_i^\mu; S_j^- \rangle\rangle_\eta - \langle\langle S_i^\mu \rangle \langle S_k^\nu \rangle; S_j^- \rangle\rangle_\eta \quad (71)$$

を行い，連立方程式が閉じるようにする。ここで便宜のために記号 $\hat{G}_{ij,\eta}^{z-} = \langle\langle (S_i^z - \langle S_i^z \rangle); S_j^- \rangle\rangle_\eta$ を導入しておく。フーリエ変換は

$$G_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{\mu-} = \frac{2}{N} \sum_{i\alpha,j\beta} G_{i\alpha j\beta,\eta}^{\mu-} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i\alpha}-\mathbf{R}_{j\beta})}, \quad \hat{G}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{\mu-} = \frac{2}{N} \sum_{i\alpha,j\beta} \hat{G}_{i\alpha j\beta,\eta}^{\mu-} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i\alpha}-\mathbf{R}_{j\beta})} \quad (72)$$

で定義される。ここで $\alpha, \beta = A, B$ は，そのサイトが “up”(A) 副格子か “down”(B) 副格子のどちらに所属しているかを示しており，それぞれの副格子は $N/2$ 個の格子点から成る。系の対称性から磁化の各成分は $\langle S_{iA}^x \rangle = -\langle S_{iB}^x \rangle = m^x$ ， $\langle S_{iA}^z \rangle = \langle S_{iB}^z \rangle = m^z$ と定義できる。²¹ フーリエ変換を行い，式(68)を変形すると

$$(\omega \mathbf{1} - \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{q}}) \mathbf{G}_{\mathbf{q},\eta} = \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{q},\eta} \quad (73)$$

と書ける。ただし， 6×6 行列 $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{q}}$ は

$$\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}_{AA} & \mathbf{\Gamma}_{q,AB} \\ \mathbf{\Gamma}_{q,BA} & \mathbf{\Gamma}_{BB} \end{pmatrix}, \quad (74)$$

$$\mathbf{\Gamma}_{AA} = \begin{pmatrix} -a & 0 & -b \\ 0 & a & b \\ -b/2 & b/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma}_{q,AB} = \begin{pmatrix} c & d & -e \\ -d & -c & e \\ -e/2 & e/2 & 0 \end{pmatrix} \gamma_{\mathbf{q}}, \quad (75)$$

$$\mathbf{\Gamma}_{q,BA} = \begin{pmatrix} c & d & e \\ -d & -c & -e \\ e/2 & -e/2 & 0 \end{pmatrix} \gamma_{\mathbf{q}}, \quad \mathbf{\Gamma}_{BB} = \begin{pmatrix} -a & 0 & b \\ 0 & a & -b \\ b/2 & -b/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (76)$$

で与えられる。ここで $a = zJm^z - h$ ， $b = zJ\Delta m^x$ ， $c = zJ(\Delta+1)m^z/2$ ， $d = zJ(\Delta-1)m^z/2$ ， $e = zJm^x$ であり，2次元正方格子の最近接サイト数 z とフーリエ因子 $\gamma_{\mathbf{q}}$ は $z=4$ ， $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ である。 6×2 行列 $\mathbf{G}_{\mathbf{q},\eta}$ は

$$\mathbf{G}_{\mathbf{q},\eta} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{q,AA,\eta} & \mathbf{G}_{q,AB,\eta} \\ \mathbf{G}_{q,BA,\eta} & \mathbf{G}_{q,BB,\eta} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta} = \begin{pmatrix} G_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{+-} \\ G_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{--} \\ \hat{G}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{z-} \end{pmatrix}; \quad \alpha, \beta = A, B \quad (77)$$

で定義する。さらに， 6×2 行列 $\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{q},\eta}$ は

$$\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{q},\eta} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}_{q,AA,\eta} & \mathbf{\Lambda}_{q,AB,\eta} \\ \mathbf{\Lambda}_{q,BA,\eta} & \mathbf{\Lambda}_{q,BB,\eta} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta} = \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{+-} \\ \Lambda_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{--} \\ \hat{\Lambda}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{z-} \end{pmatrix}; \quad \alpha, \beta = A, B \quad (78)$$

²¹ 図 5(b) 参照。

で与えられる。ここで $\Lambda_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{\mu-}$ と $\hat{\Lambda}_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{z-}$ は $\langle [S_{i\alpha}^{\mu}, S_{j\beta}^{-}]_{\eta} \rangle$, $\langle [(S_{i\alpha}^z - \langle S_{i\alpha}^z \rangle), S_{j\beta}^{-}]_{\eta} \rangle$ をそれぞれフーリエ変換したものである。スピン演算子の交換関係から $\Lambda_{\mathbf{q},\alpha\beta,-1}$ の各成分は \mathbf{q} に依存せず、

$$\Lambda_{\mathbf{q},\alpha\beta,-1} = \Lambda_{\alpha\beta,-1} = \begin{pmatrix} 2\langle S_{i\alpha}^z \rangle \delta_{\alpha\beta} \\ 0 \\ -\langle S_{i\alpha}^x \rangle \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix}; \quad \alpha, \beta = A, B \quad (79)$$

となる。グリーン関数 $G_{\mathbf{q},\alpha\beta,\eta}^{\mu-}$ は方程式 $\det(\omega \mathbf{1} - \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{q}}) = 0$ の解、

$$\omega = 0, \quad 0, \quad \pm \omega_{\mathbf{q},+}, \quad \pm \omega_{\mathbf{q},-} \quad (80)$$

に対応する極を持ち得る。ここで

$$\omega_{\mathbf{q},\pm} = \sqrt{(a \pm c\gamma_{\mathbf{q}})^2 + b^2 - (d\gamma_{\mathbf{q}})^2 - (e\gamma_{\mathbf{q}})^2} \quad (81)$$

とする。各々の交換グリーン関数が解析的性質 (20) を守ることを要請すると

$$m^x (h - zJ(\Delta + 1)m^z) = 0 \quad (82)$$

が導かれる。これは RPA の範囲での $\langle [S_i^{\pm}, H] \rangle = 0$ の条件に対応している。一方、反交換グリーン関数は $\omega = 0$ に極を持ち、したがって式 (21) における

$$C_{\mathbf{q},\alpha\beta,+1}^{\mu-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G_{\mathbf{q},\alpha\beta,+1}^{\mu-} \quad (83)$$

の項は有限の値を持つ。しかしながら $C_{\mathbf{q},\alpha\beta,+1}^{+-} = C_{\mathbf{q},\alpha\beta,+1}^{--}$ という事実を用いることで簡潔に計算を行うことができる。具体的には 2 つのグリーン関数の差 $G_{\mathbf{q},AA,\eta}^{+-} - G_{\mathbf{q},AA,\eta}^{--}$ を用いればよい。 $\eta = -1$ に対する表式は

$$G_{\mathbf{q},AA,-1}^{+-} - G_{\mathbf{q},AA,-1}^{--} = \sum_{\alpha=\pm} \frac{m^x(b + \alpha e\gamma_{\mathbf{q}}) - m^z(a + \alpha c\gamma_{\mathbf{q}} + \alpha d\gamma_{\mathbf{q}} + \omega)}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q},\alpha}^2} \quad (84)$$

で与えられる。

4.1.2 スピン再配向転移

この系における磁化の振る舞いを見るために、 $G_{\mathbf{q},AA,\eta}^{+-} - G_{\mathbf{q},AA,\eta}^{--}$ に対しスペクトル定理 (21) を用いると

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\alpha=\pm} \frac{m^x(b + \alpha e\gamma_{\mathbf{q}}) - m^z(a + \alpha c\gamma_{\mathbf{q}} + \alpha d\gamma_{\mathbf{q}})}{2\omega_{\mathbf{q},\alpha}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q},\alpha}}{2} \quad (85)$$

という表式が得られる。ここでスピン-1/2 演算子の性質 $\{S_i^+, S_i^-\} = 1$ と $(S_i^-)^2 = 0$ を用いた。式 (82) と (85) から磁化の各成分 m^x と m^z を求めることができる。図 6 に示すように、 $h = 0$ では x 軸（磁化容易軸）方向に配向した反強磁性的な秩序を持っているが、磁場の増加に伴い磁化の方向が回転していき（ m^x が減少し、 m^z が増加して）ある磁場の大きさ h_R/J で完全に z 軸方向を向く（ $m^x = 0$ ）。ここでは反強磁性的な交換相互作用の場合を取り扱ったが、強磁性的な場合もより簡単な計算で同様の議論ができる。

この節では、RPA 切断をもとにしたグリーン関数法を磁化の方向が変化するような系に対して適用した。得られた結果は、この手法がこのような比較的複雑な系に対してもある程度有効な方法であ

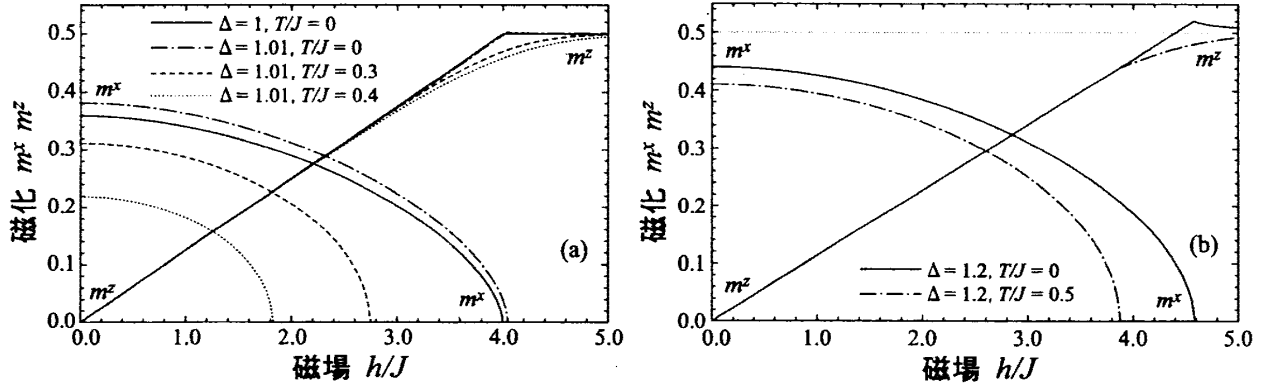


図 6: 磁化の各成分 m^x , m^z の磁場依存性. (a) $\Delta = 1, 1.01$ の場合. (b) $\Delta = 1.2$ の場合.

ることを示唆している. しかしながら, 異方性 Δ の値が大きいたときには注意が必要である. この場合, 図 6(b) に顕著に見られるように温度 T の値によっては $h = h_R$ 付近で $|\langle \mathbf{S}_i \rangle| = \sqrt{(m^x)^2 + (m^z)^2} > S$ となり, 物理的に許される値の最大値 S (今の場合は $1/2$) を超えてしまう. この事実についてはいくつかの文献, 例えば [51] などでも触れられており, このような系に対して RPA の方法を適用する際の問題点の一つである.

4.2 面内磁場中の容易面異方性を持つ強磁性体

前節では, 容易軸異方性を持つ反強磁性体におけるスピン再配向の問題に対して RPA のグリーン関数法を適用した. その結果, (少なくとも前節の手順では) $|\langle \mathbf{S}_i \rangle| > S$ という不都合な結果を導いてしまうことを述べた. このように, 磁化の方向を中心とした回転対称性を持たない (磁化の方向に垂直な面上で異方性がある) 系に RPA の方法を適用することには注意が必要である. 以下では, この問題について深く議論するために, よりシンプルな系, 磁化容易面異方性を持つ強磁性体を取り上げる. この系は, 前節のものと同様に磁化の方向を中心とした回転対称性を持たないが, 比較的単純な模型であるため RPA の方法を適用する際の問題点をより明確化できる.²²

ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z \right) - h \sum_i S_i^x \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left(S_i^- S_j^+ + \Delta S_i^z S_j^z \right) - \frac{h}{2} \sum_i (S_i^+ + S_i^-) \end{aligned} \quad (86)$$

と書ける. ここでは強磁性的な最近接相互作用 $J_{ij} > 0$ を考え, 容易面異方性 ($0 < \Delta \leq 1$) がある場合を取り扱う. 容易面内のある方向 (x 方向) に磁場を印加し, その大きさを h とする. この場合, 有限の値を持ちうる磁化の成分は, 明らかに磁場をかけた方向のみである. (すなわち $\langle S_i^x \rangle = m$, $\langle S_i^y \rangle = \langle S_i^z \rangle = 0$ となる.)

²²我々の最近の報告 [38] もあわせて参照のこと.

4.2.1 通常のグリーン関数の組を用いた方法

量子スピン系に対するグリーン関数法による解析では、グリーン関数の組 $G_{ij,\eta}^{+-,mn}$, $G_{ij,\eta}^{--,mn}$, $G_{ij,\eta}^{z-,mn}$ がしばしば用いられる。ここで、

$$G_{ij,\eta}^{\mu-,mn} = \langle \langle S_i^\mu; (S_j^-)^m (S_j^-)^n \rangle \rangle_\eta \quad (87)$$

($m \geq 0$ と $n \geq 1$ は正の整数) である。後者 2 つ ($G_{ij,\eta}^{--,mn}$ と $G_{ij,\eta}^{z-,mn}$) は、特に系が比較的複雑な場合に必要となる [27, 49–53]。議論が煩雑になるのを避けるために、スピン $S = 1/2$ の場合を取り扱うことにすると、上記の組は 3 つのグリーン関数 $G_{ij,\eta}^{+-} = \langle \langle S_i^+; S_j^- \rangle \rangle_\eta$, $G_{ij,\eta}^{--} = \langle \langle S_i^-; S_j^- \rangle \rangle_\eta$, $G_{ij,\eta}^{z-} = \langle \langle S_i^z; S_j^- \rangle \rangle_\eta$ のみに帰着する。ここではまず、前節でもそうしたように、この通常の (よく用いられる) グリーン関数の組をもとに、ハミルトニアン (86) で表される系の磁氣的性質を計算してみる。

これらのグリーン関数に対する運動方程式は

$$\omega G_{ij,\eta}^{\mu-}(\omega) = \langle [S_i^\mu, S_j^-]_\eta \rangle + \langle \langle [S_i^\mu, H]; S_j^- \rangle \rangle_{\eta,\omega}, \quad (88)$$

$$[S_i^\pm, H] = \mp \sum_k J_{ik} (S_i^\pm S_k^\pm - \Delta S_i^\pm S_k^\pm) \mp h S_i^\pm, \quad (89)$$

$$[S_i^z, H] = -\frac{1}{2} \sum_k J_{ik} (S_i^+ S_k^- - S_i^- S_k^+) - \frac{h}{2} (S_i^+ - S_i^-) \quad (90)$$

となる。連立方程式を閉じるために、再び (一般化された) RPA 切断 (71) を採用する。フーリエ変換

$$G_{\mathbf{q},\eta}^{\mu\nu} = \frac{1}{N} \sum_{ij} G_{ij,\eta}^{\mu\nu} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad \Lambda_{\mathbf{q},\eta}^{\mu\nu} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle [S_i^\mu, S_j^\nu]_\eta \rangle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (91)$$

を行い、式 (88) を行列形式で書き換えると、

$$\left[\omega \mathbf{1} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}} \\ 0 & 0 & \tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}} \\ -\Gamma_{\mathbf{q}}/2 & \Gamma_{\mathbf{q}}/2 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} G_{\mathbf{q},\eta}^{+-} \\ G_{\mathbf{q},\eta}^{--} \\ G_{\mathbf{q},\eta}^{z-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathbf{q},\eta}^{+-} \\ \Lambda_{\mathbf{q},\eta}^{--} \\ \Lambda_{\mathbf{q},\eta}^{z-} \end{pmatrix} \quad (92)$$

となる。ここで $\tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}} = h + zJm(1 - \Delta\gamma_{\mathbf{q}})$, $\Gamma_{\mathbf{q}} = h + zJm(1 - \gamma_{\mathbf{q}})$ であり、最近接サイト数 z とフーリエ因子 $\gamma_{\mathbf{q}}$ は 1 次元鎖のとき $z = 2$, $\gamma_{\mathbf{q}} = \cos q_x$, 正方格子なら $z = 4$, $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ である。式 (92) を解くことで、交換グリーン関数

$$G_{\mathbf{q},-1}^{\pm-} = \frac{\pm m \tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad G_{\mathbf{q},-1}^{z-} = \frac{-m\omega}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \quad (93)$$

を得る。ただし $\omega_{\mathbf{q}}^2 = \tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{q}}$ とした。反交換グリーン関数 $G_{\mathbf{q},+1}^{\pm-}$ は $\omega = 0$ に極を持ち、これから

$$C_{\mathbf{q},+1}^{\pm-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G_{\mathbf{q},+1}^{\pm-} = \frac{\Lambda_{\mathbf{q},+1}^{+-} + \Lambda_{\mathbf{q},+1}^{--}}{2} \quad (94)$$

を得る。ここでスペクトル定理 (21) を用いると、式

$$\frac{\Lambda_{\mathbf{q},+1}^{+-} - \Lambda_{\mathbf{q},+1}^{--}}{2} = \frac{m \tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{q}}}{2}, \quad (95)$$

$$\Lambda_{\mathbf{q},+1}^{z-} = 0 \quad (96)$$

が導出できる。 $G_{\mathbf{q},\eta}^{+-}$ と $G_{\mathbf{q},\eta}^{--}$ に対するスペクトル定理の適用は、同じ式 (95) に帰着する。さらにこの式から

$$\frac{\langle \{S_i^+, S_i^-\} \rangle}{2} - \langle (S_i^-)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{m\tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q}}}{2} \quad (97)$$

を得る。交換関係以外に一般のスピン S の演算子が持つ性質

$$\{S_i^+, S_i^-\} = 2(S(S+1) - (S_i^z)^2) \quad (98)$$

に加え、スピン-1/2 演算子は

$$(S_i^+)^2 = (S_i^-)^2 = 0, \quad (S_i^z)^2 = \frac{1}{4} \quad (99)$$

を満たす。ここで、よく行われるように、演算子の性質 (98) と (99) が RPA の枠組みでも満たされることを要請すると、式 (97) は

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{m\tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q}}}{2} \quad (100)$$

となる。この式を自己無撞着に解くことで、磁化 m を計算することができる。

この小節で我々は、通常のグリーン関数の組を用いた RPA の方法を容易面異方性を持つ強磁性体の場合に適用した。この系は比較的シンプルであるために、QMC による数値解との比較などから手法の妥当性を検証することが容易である。ここで用いた方法は、これまでに数々の文献（例えば [27, 49–53] など）の中で、主に横磁場のある容易軸異方性 ($\Delta > 1$) を持つ系の解析の際に用いられてきたものと同等の手法である [64]。しかし後に述べるように、式 (100) から導かれる結果は QMC による数値解と比較してあまり良い一致が見られない。

4.2.2 互いに矛盾する 2 つの方程式

ここまでの計算では、先行研究でしばしば採用される手法に従い、3 つのグリーン関数の組 $\{G_{ij,\eta}^{+-}, G_{ij,\eta}^{--}, G_{ij,\eta}^{zz}\}$ と式 (98) と (99) の条件を用いた。しかしながら、このグリーン関数の組だけでは、スピン空間のすべての方向を網羅してはいない。そこで、以下ではスピン演算子の組み合わせから成るすべてのグリーン関数

$$G_{ij,\eta}^{\mu\nu} = \langle \langle S_i^\mu; S_j^\nu \rangle \rangle_\eta \quad (\mu, \nu = x, y, z) \quad (101)$$

を考慮する。これらに対する運動方程式は

$$\omega G_{ij,\eta}^{\mu\nu}(\omega) = \langle [S_i^\mu, S_j^\nu] \rangle_\eta + \langle \langle [S_i^\mu, H]; S_j^\nu \rangle \rangle_{\eta,\omega}, \quad (102)$$

$$[S_i^x, H] = -i \sum_k J_{ik} (S_i^z S_k^y - \Delta S_i^y S_k^z), \quad (103)$$

$$[S_i^y, H] = -i \sum_k J_{ik} (\Delta S_i^x S_k^z - S_i^z S_k^x) + i\hbar S_i^z, \quad (104)$$

$$[S_i^z, H] = -i \sum_k J_{ik} (S_i^y S_k^x - S_i^x S_k^y) - i\hbar S_i^y \quad (105)$$

で与えられる。これまでと同様に RPA 切断

$$\langle\langle S_i^\mu S_k^\nu; S_j^\lambda \rangle\rangle_\eta \approx \langle S_i^\mu \rangle \langle\langle S_k^\nu; S_j^\lambda \rangle\rangle_\eta + \langle S_k^\nu \rangle \langle\langle S_i^\mu; S_j^\lambda \rangle\rangle_\eta - \langle\langle S_i^\mu \rangle \langle S_k^\nu \rangle; S_j^\lambda \rangle\rangle_\eta \quad (106)$$

を行い、式 (91) のフーリエ変換を行うと、

$$\left[\omega \mathbf{1} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\tilde{\Gamma}_q \\ 0 & -i\Gamma_q & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} G_{q,\eta}^{x\nu} \\ G_{q,\eta}^{y\nu} \\ G_{q,\eta}^{z\nu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{q,\eta}^{x\nu} \\ \Lambda_{q,\eta}^{y\nu} \\ \Lambda_{q,\eta}^{z\nu} \end{pmatrix} \quad (107)$$

を得る。この式を解くことで、交換グリーン関数

$$G_{q,-1}^{x\nu} = 0, \quad (108)$$

$$G_{q,-1}^{y\nu} = \frac{\omega \Lambda_{-1}^{y\nu} + i\tilde{\Gamma}_q \Lambda_{-1}^{z\nu}}{\omega^2 - \omega_q^2}, \quad (109)$$

$$G_{q,-1}^{z\nu} = \frac{\omega \Lambda_{-1}^{z\nu} - i\Gamma_q \Lambda_{-1}^{y\nu}}{\omega^2 - \omega_q^2} \quad (110)$$

が導出される。 $\Lambda_{q,-1}^{\mu\nu}$ は q に依存しないため、添え字 q は落として書いた。また、任意の ν に対して $\Lambda_{-1}^{x\nu} = 0$ である。さらに、反交換グリーン関数から

$$C_{q,+1}^{x\nu} = \Lambda_{q,+1}^{x\nu}, \quad C_{q,+1}^{y\nu} = C_{q,+1}^{z\nu} = 0 \quad (111)$$

が導かれる。これらにスペクトル定理 (21) を適用すると、方程式

$$\Lambda_{q,+1}^{y\nu} = \frac{i\tilde{\Gamma}_q \Lambda_{-1}^{z\nu}}{\omega_q} \coth \frac{\beta\omega_q}{2}, \quad (112)$$

$$\Lambda_{q,+1}^{z\nu} = \frac{-i\Gamma_q \Lambda_{-1}^{y\nu}}{\omega_q} \coth \frac{\beta\omega_q}{2} \quad (113)$$

を得る。²³ さらに式 (112) と (113) から、それぞれ $\nu = y$ と $\nu = z$ に対して、磁化 m に関する方程式

$$\langle\langle S_i^y \rangle^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \frac{m\tilde{\Gamma}_q}{2\omega_q} \coth \frac{\beta\omega_q}{2}, \quad (114)$$

$$\langle\langle S_i^z \rangle^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \frac{m\Gamma_q}{2\omega_q} \coth \frac{\beta\omega_q}{2} \quad (115)$$

が導出される。ここで、スピン-1/2 演算子の性質 $(S_i^y)^2 = 1/4$ が満たされることを要請すると、式 (114) から再び式 (100) が得られる。加えて、 $(S_i^z)^2 = 1/4$ と式 (115) からのもう一つの方程式

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{m\Gamma_q}{\omega_q} \coth \frac{\beta\omega_q}{2} \quad (116)$$

が導かれる。これは、前小節で3つのグリーン関数の組 $\{G_{ij,\eta}^{+-}, G_{ij,\eta}^{--}, G_{ij,\eta}^{z-}\}$ のみを用いたときには見つからなかった式である。しかし、明らかに2つの方程式 (100) と (116) は、等方的な場合 ($\Delta = 1$) を除いて、互いに矛盾する。言い換えると、1つの未知量 m に対して方程式が2つあり、それぞれの式から異なる磁化 m の値が得られる。このように、スピン演算子が本来持つ性質

²³ $G_{q,\eta}^{x\nu}$ からは自明な式 $\Lambda_{q,+1}^{x\nu} = \Lambda_{q,+1}^{x\nu}$ が導かれる。

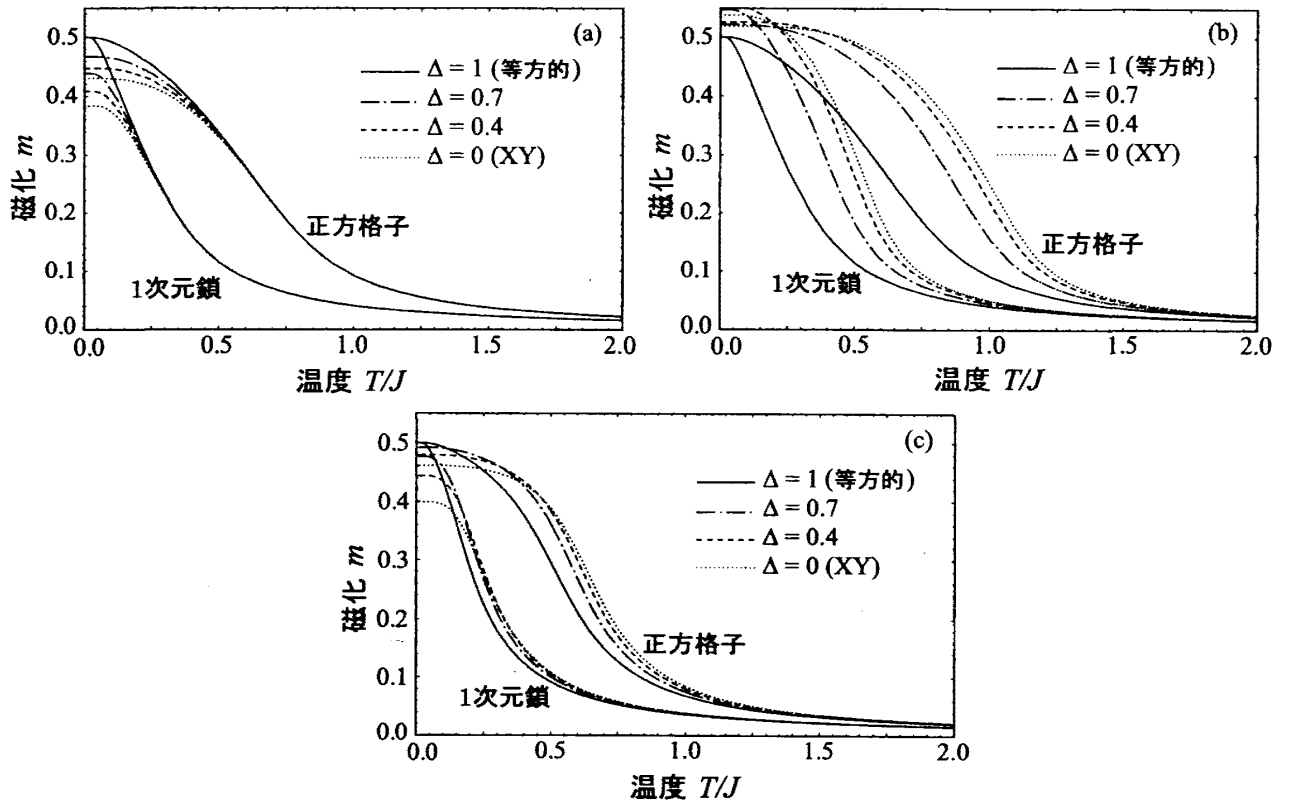


図 7: 容易面異方性を持つ強磁性体の面内磁場 $h/J = 0.1$ における磁化の温度依存性. それぞれの線は, $\Delta = 1$ (等方的ハイゼンベルグ模型), $\Delta = 0.7$, $\Delta = 0.4$, $\Delta = 0$ (XY 模型) に対応している. それぞれの図は (a) 式 (100), (b) 式 (116), (c) QMC から得られる結果 [35–38] である.

$(S_i^y)^2 = (S_i^z)^2 = 1/4$ が完全に満たされることを要請する上述の方法は, 磁化の方向と垂直な面に異方性がある系では整合性を失ってしまう.²⁴ ここで扱った系に限らず, 磁化の方向を中心とした回転対称性が無いような系に RPA の方法を適用する場合は同様な問題が常に生じ得ると考えられる.

RPA の適用下では (何らかの理由によって) グリーン関数 (101) の S_j^y の選び方に制限が課されると仮定するなら, 一応この問題を避けることができる. この考えは Brown により容易軸異方性の系を扱った文献 [48] の中で導入されている. もし S_j^y の選び方が交換相互作用の異方軸 (z 軸) に垂直な方向だけに限られるならば, $S_j^y = S_j^z$ のみが採用され, 式 (112) から式 (100) が導かれるのみで式 (116) は得られない. 反対に, $S_j^y = S_j^z$ の制限のもとでは式 (116) のみが導かれる.

図 7 に, それぞれの場合で得られる磁化 m の温度依存性を QMC による数値解 [35–38] とともに示す. ただちに分かるように, 式 (116) から得られる結果 [図 7(b)] は明らかに $|\langle S_i \rangle| \leq S$ を破っている. よって S_j^y の選択が S_j^z に限られるという仮定は誤っていると考えられる. 一方, $S_j^y = S_j^z$ から得られる結果 [図 7(a)] では少なくとも $|\langle S_i \rangle| \leq S$ の条件は守られている. しかしながら温度が上昇するにつれて QMC の結果との一致が悪くなっていくことが見て取れる. 特に, QMC の結果では異方性パラメータ Δ の異なる曲線同士が交差する点が存在するが, 図 7(a) では線同士が互いに交わらない. このことはグリーン関数の選択が $S_j^y = S_j^z$ に制限されると仮定して得られた結果では, 異方性の効果が正しく取り入れられていないことを示唆している.

²⁴ $\Delta = 1$ のときは, 2 つの方程式は完全に同一のものであり, それを解くと当然図 3 の結果が得られる.

結局, 式(100), (116)のどちらからでもQMCの数値解と整合する結果は得られなかった. RPAの適用下においては S_i^y の選び方が制限されるという考えは, そもそも理由が不明瞭であり, また, 我々が上で示した結果からも妥当であるとは考えにくい.

さて, 第4.2.1節で展開した通常の3つのグリーン関数の組と条件(98), (99)を用いる手法は, 2つの式のうちの式(100)を導くことは既に述べた. この方法はこれまで特に容易軸異方性を持つ磁性体のスピン再配向問題を取り扱う際によく用いられてきた[27, 49–53]. しかしながら, 上で述べたように, 式(100)から得られる結果はQMCの数値解と整合しない. 我々が容易面異方性の模型を用いて示したこの結果は, これまでの方法に何らかの修正が必要となることを示唆している.

4.2.3 矛盾が生じる理由と手法の改良

互いに矛盾する2つの式(100)と(116)が導出される理由について議論する. スピン-1/2演算子の性質から厳密な $(S_i^y)^2$ と $(S_i^z)^2$ の値は等しく, その値は1/4である. しかしながら我々は切断近似を用いたので, $\langle (S_i^y)^2 \rangle$ と $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ はそれぞれ厳密な値からのエラーを持っている. また, 式(86)のハミルトニアンを見ると分かるように, パラメータ Δ が yz 面内の異方性を引き起こすため系は $S^y \leftrightarrow S^z$ の交換のもとで対称ではなくなっている. (その結果, yz 面内で異方的なスピン揺らぎが生じているはずである.) それにもかかわらず, 式(106)のRPA切断は S_i^y, S_i^z のどちらの時間発展に対しても“平等に”近似するので $\langle (S_i^y)^2 \rangle$ と $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ のエラーが“異方的”になってしまう.²⁵ よって, RPAの枠組みにおいて式(114)と(115)に対し条件 $\langle (S_i^y)^2 \rangle = \langle (S_i^z)^2 \rangle = 1/4$ が守られることを課すと, 得られる2つの式の間に矛盾が生じてしまうのだと考えられる.

では, 物理的に妥当な結果を得るためにはどのように手法を改良すればよいのであろうか. 一般のスピン S において, 演算子 S_i^2 の固有値は $S(S+1)$ である. スピン演算子は, この関係式

$$S_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = S(S+1) \quad (117)$$

に加え, それぞれの成分に対して

$$\prod_{r=-S}^S (S_i^x + r) = 0, \quad (118a)$$

$$\prod_{r=-S}^S (S_i^y + r) = 0, \quad (118b)$$

$$\prod_{r=-S}^S (S_i^z + r) = 0 \quad (118c)$$

を満たすという性質を持っている.²⁶ RPA切断を用いたグリーン関数法では, これらの厳しい条件式をすべて満たすように要請すると, 両立しない2つの式(100)と(116)が導出されるという不具合が生じることは既に述べた. よって, ここで扱ったような異方性のある系にRPAの方法を適用する際には, スピン演算子に対するこれらの拘束条件を近似的に緩めなければならない.

さて, 式(107)を見ると分かるように式(112)と(113)を導出する際, $G_{ij,\eta}^{xy}$ に関する計算は実際には必要でない. つまり, 磁化 m に関するこれら2つの式を導出する際には S_i^y と S_i^z の時間発展²⁷に対してのみ, 高次の項に対する切断近似を行えばよい. このことは, 関係式(118b)や(118c)

²⁵概念的に書くと $|\langle (S_i^y)^2 \rangle_{\text{RPA}} - 1/4| \neq |\langle (S_i^z)^2 \rangle_{\text{RPA}} - 1/4|$.

²⁶スピン $S = 1/2$ のとき, 例えば式(118b)からは $(S_i^y)^2 = 1/4$ が得られる.

²⁷すなわち, 式(104)と(105).

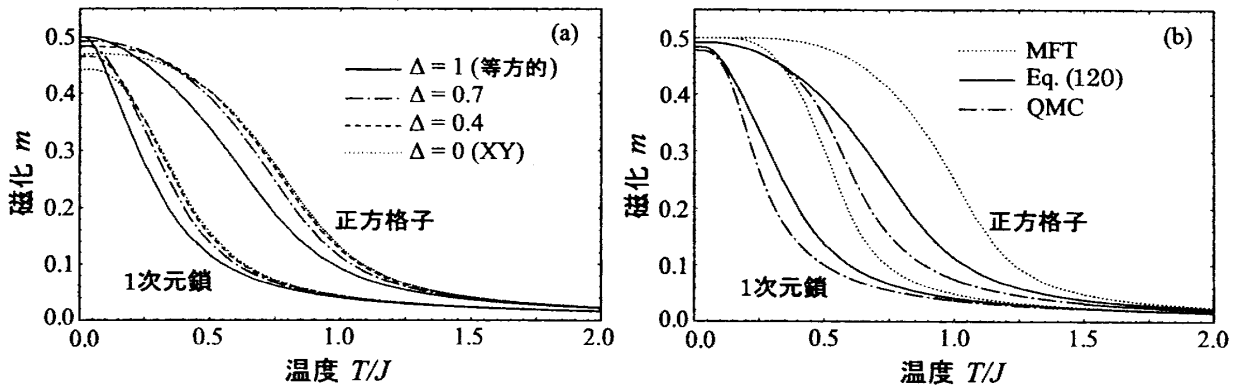


図 8: (a) 式 (120) から得られる磁化の温度依存性. 磁場の大きさは $h/J = 0.1$ としている. (b) MFT, QMC の結果との比較. 磁場の大きさは $h/J = 0.1$, 異方性パラメータの大きさは $\Delta = 0.7$ とした.

を磁化 m を決定するための条件式として用いることが妥当ではないことを示唆している. (実際に図 7(a), (b) に示したように, どちらの条件から導かれる結果も物理的に妥当ではなかった.) したがって我々は磁化の方向 (x 軸の方向) に関する恒等式 (118a) を満たすことを要請することにする. 今考えているスピン $S = 1/2$ のときには, 式 (117) と (118a) から磁化を決定するための方程式として

$$\langle (S_i^y)^2 \rangle_{\text{RPA}} + \langle (S_i^z)^2 \rangle_{\text{RPA}} = \frac{1}{2} \quad (119)$$

を得る. この式は Aoki が “self-consistent spin-wave approach” [65] の中で用いたものと同等である. 式 (114) と (115) を代入すると, 自己無撞着な方程式

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{m(\tilde{\Gamma}_{\mathbf{q}} + \Gamma_{\mathbf{q}})}{2\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q}}}{2} \quad (120)$$

が導出される. $\Delta = 1$ のとき, この式は等方的ハイゼンベルグ模型に対する通常の RPA の結果 (図 3) を再現する.

式 (120) から得られる磁化 m の温度依存性は, QMC による数値解 [図 7(c)] と良い精度で整合していることが図 8(a) を見ると分かる. 特に, 異なる異方性パラメータに対応する線が互いに交差し, 低温側と高温側で磁化の大きさの順序が逆になるという振る舞いが期待通りに再現されている. さらに図 8(b) には式 (120), QMC, MFT それぞれから得られる結果を比較した. MFT では, 式 (86) のハミルトニアンにおける $S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z$ の項が及ぼす影響が完全に無視されるため, 得られる磁化は異方性パラメータ Δ の大きさに依存しない:

$$m^{(\text{MFT})} = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta(h + zJm^{(\text{MFT})})}{2}. \quad (121)$$

一方, 我々の手法から得られる結果 (及び QMC の結果) では, 異方性の影響が正しく取り入れられていることが分かる. 低温では ($T = 0$ でさえ) 異方性 $(1 - \Delta)$ によって引き起こされる量子揺らぎが磁化を抑制するため, 異方性が大きいほど (Δ が 1 から離れるほど) 磁化 m の値は小さくなる. 量子揺らぎの効果が小さくなる高温側では, 単純に “容易面” 異方性によるエネルギー利得のために, スピンは容易面内に配向しようとし, 結果的に異方性 $(1 - \Delta)$ が大きいほど磁化 m

の値が大きくなる。このように、異方性パラメータ Δ は低温側と高温側で全く逆の働きをするため図 7(c) や図 8(a) に見られるような線同士の交差が生じる。

この節では容易面異方性を持つ強磁性体への RPA 切断の方法の適用について議論した。この系は、磁化の方向に垂直な面内において（交換相互作用などに）異方性がある系の中で最もシンプルなものの 1 つである。我々はこのシンプルな模型に対し RPA 切断法を用いて計算し、QMC の数値解と比較することでその問題点と解決方法を詳細に議論した。最も重要なことは、このような系においてはスピン演算子が本来持っている性質 (118) のすべてを満たすように要求することが（RPA の枠組みの中では）できないということである。我々はいくつかの議論の後に、それらの性質の中でも特に磁化の方向に関するスピン演算子の恒等式を満たすように要請することで、物理的に妥当な（QMC と整合する）結果を得ることができることを示した。磁化を決定する方程式としてその他の恒等式を採用すると、明らかに不適当な結果が導かれる。このことは従来の方法、グリーン関数の組 $\{G_{ij,\eta}^{+-}, G_{ij,\eta}^{--}, G_{ij,\eta}^{zz}\}$ と条件 (98), (99) を用いる手法が、常に良い結果を導くとは限らないことを意味している。実際、今回扱ったような磁化が x 軸の方向に沿って現れる場合、この手法は恒等式 (118b) を要請することと同値であり、得られる結果は物理的に不適当なものになる。

ここでは容易面異方性を持つ強磁性体を例に取ったが、第 4.2 節で取り扱ったような磁化の方向が磁場によって変化する系に関しても同様な議論が必要であると考えられる。実際、従来の方法を用いて計算すると、磁化の値が物理的な最大値 S を超えてしまうという不具合が起こることは既に述べた。これらの系に対しても、RPA の方法に何らかの修正が必要であることはもはや疑うべくもないだろう。²⁸

5 2次元 t - J 模型における反強磁性秩序

t - J 模型の考察に話を戻そう。第 2 章で述べたように、 t - J ハミルトニアンはスピンレスフェルミオンとスピン-1/2 演算子を用いた表示に厳密に書き換えることができる。ここで再び擬スピン表示での t - J ハミルトニアンを書き下しておこう：

$$H_{\text{PR}} = - \sum_{i,j} \left[t_{ij} h_i h_j^\dagger \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{4} + \mathbf{n} \cdot \left(\frac{1}{2} \mathbf{S}_i + \frac{1}{2} \mathbf{S}_j + i \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \right) \right\} \right] - \mu \sum_i h_i^\dagger h_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} h_i h_i^\dagger \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j h_j h_j^\dagger. \quad (122)$$

ここで $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ である。²⁹ この節では、銅酸化物の物性を記述する 2 次元正方格子上的 t - J 模型における反強磁性秩序のドーピング量依存性について議論する。³⁰ 実際の計算には、第 3, 4 章で取り扱ったグリーン関数の方法を用いる。

5.1 副格子磁化

まず反強磁性秩序の秩序変数として副格子磁化（スタガード磁化）を定義する。ここで副格子磁化が現れる方向を x 軸（の正負の方向）と決めても一般性を失わない。変換 (10) を用いると、

²⁸ そもそも RPA の範囲でこのような問題を取り扱うこと自体が困難であるという結論になる可能性ももちろんあるが。

²⁹ より一般的には擬スピンの方向 θ と φ もサイトごとに任意の値に取ることができるが、ここでは扱わない。

³⁰ 文献 [18, 19] も併せて参照のこと。

実スピン演算子 s_i^x の期待値は

$$\langle s_i^x \rangle = \langle (1 - h_i^\dagger h_i) S_i^x \rangle = \langle S_i^x \rangle - \langle h_i^\dagger h_i S_i^x \rangle \quad (123)$$

と表せる. この式の第2項は式(11)で定義される擬スピン演算子 p_i^x の期待値に対応している. ここで擬スピンの方向 θ, φ を x 軸に垂直な方向にとると, この第2項を除去することができ, $\langle S_{iA}^x \rangle = -\langle S_{iB}^x \rangle = m$ を副格子磁化と見なせる. (A, B は2つの異なる副格子を示している.) ここでは擬スピンの方向を z 軸に選ぶ ($\theta = 0$) ことにする.³¹ このとき演算子の変換と各々の状態の対応関係は,

$$\tilde{c}_{i\uparrow} = h_i^\dagger S_i^+ S_i^-, \quad \tilde{c}_{i\downarrow} = h_i^\dagger S_i^+, \quad (124)$$

$$|i, 0\rangle \rightarrow |i, 1\rangle_h |i, \uparrow\rangle_s, \quad |i, \uparrow\rangle \rightarrow |i, 0\rangle_h |i, \uparrow\rangle_s, \quad |i, \downarrow\rangle \rightarrow |i, 0\rangle_h |i, \downarrow\rangle_s \quad (125)$$

と書ける.

5.2 平均場ハミルトニアン

平均場近似は十分に定量的な結果を導くとは限らないが, 物理を知るための第一歩として有意義な方法である. ここでは平均場近似のもとで擬スピン表示の t - J 模型 (H_{PR}) を演算子 h_i から成る“電荷部分” H_h^{MF} と演算子 S_i から成る“スピン部分” H_S^{MF} に分割して取り扱うことにする:

$$H_h^{\text{MF}} = \sum_{i,j} t_{ij}^{\text{eff}} h_j^\dagger h_i - \mu \sum_i h_i^\dagger h_i, \quad (126)$$

$$H_S^{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{eff}} (S_i^- S_j^+ + S_i^z S_j^z) - h^{\text{eff}} \sum_i S_i^z. \quad (127)$$

ここで $t_{ij}^{\text{eff}} = t_{ij}(1/4 + c_1^{-+} + c_1^{zz} + \tilde{m})$, $J_{ij}^{\text{eff}} = J_{ij}\{(1-\delta)^2 - \phi_1^2\} + 2t_{ij}\phi_1$, $h^{\text{eff}} = -4t\phi_1$ である. ただし $c_{|i-j|}^{\mu\nu} = \langle S_i^\mu S_j^\nu \rangle$, $\tilde{m} = \langle S_i^z \rangle$, $\delta = \langle h_i^\dagger h_i \rangle$, $\phi_{|i-j|} = \langle h_i^\dagger h_j \rangle$ とした. さらに H_S^{MF} の対称性より得られる $\langle (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)_z \rangle = 0$ を用いた. H_h^{MF} は実効的な飛び移り積分 t^{eff} を持つ通常の自由フェルミオンのハミルトニアンであり, H_S^{MF} は横磁場 h^{eff} 中の交換相互作用 J_{ij}^{eff} を持つ等方的ハイゼンベルグ反強磁性体のハミルトニアンと同型である. これは第4.1節で扱った式(66)のハミルトニアンと

$$J_{ij} \rightarrow J_{ij}^{\text{eff}}, \quad \Delta \rightarrow 1, \quad h \rightarrow h^{\text{eff}}. \quad (128)$$

の対応がある.

5.3 磁化のドーピング量依存性

第4.1節の計算を式(66)から始める代わりに H_S^{MF} を用いて行う. この手法は第4章で議論したようにまだまだ改良の余地があるが, この場合は $\Delta = 1$ なので少なくとも $|\langle \mathbf{S}_i \rangle| \leq S$ の性質が破られる心配はない. 第4.1節と同様の計算を繰り返すと H_S^{MF} に対して

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, \alpha=\pm} \frac{m(b + ae\gamma_{\mathbf{q}}) - \tilde{m}(a + \alpha c\gamma_{\mathbf{q}})}{2\omega_{\mathbf{q}, \alpha}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q}, \alpha}}{2}, \quad (129)$$

³¹ x 軸に垂直な方向ならばどの方向にとっても結果に影響しない.

$$m \left(h^{\text{eff}} - 2zJ^{\text{eff}}\tilde{m} \right) = 0 \quad (130)$$

を得る。ここで

$$\omega_{\mathbf{q},\pm} = \sqrt{(a \pm c\gamma_{\mathbf{q}})^2 + b^2 - (e\gamma_{\mathbf{q}})^2} \quad (131)$$

であり、それぞれ $a = zJ^{\text{eff}}\tilde{m} - h^{\text{eff}}$, $b = zJ^{\text{eff}}m$, $c = zJ^{\text{eff}}\tilde{m}$, $e = zJ^{\text{eff}}m$ とした。今は2次元正方格子を考えているので $z = 4$, $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ である。さらに t_{ij}^{eff} 中の相関関数 $c_1^{-+} + c_1^{zz}$ の値を求めるために、まず $G_{\mathbf{q},\text{AA},\eta}^{+-} - G_{\mathbf{q},\text{AA},\eta}^{--}$ に対して式 (50) を利用し、

$$\begin{aligned} \langle S_i^- [S_i^+ - S_i^-, H_S^{\text{MF}}] \rangle &= zJ^{\text{eff}} \left[c_1^{-+} + c_1^{zz} - \frac{1}{2}(c_1^{-+} - c_1^{--}) - \frac{1}{2}\tilde{m} \right] + h^{\text{eff}} \left(\frac{1}{2} - \tilde{m} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\alpha=\pm} \frac{\tilde{m}\omega_{\mathbf{q},\alpha}}{2} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q},\alpha}}{2} + \tilde{m}a - mb \end{aligned} \quad (132)$$

を得る。さらに $G_{\mathbf{q},\text{AB},\eta}^{+-} - G_{\mathbf{q},\text{AB},\eta}^{--}$ にスペクトル定理を適用して

$$c_1^{-+} - c_1^{--} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q},\alpha=\pm} \alpha\gamma_{\mathbf{q}} \frac{m(b + \alpha e\gamma_{\mathbf{q}}) - \tilde{m}(a + \alpha c\gamma_{\mathbf{q}})}{2\omega_{\mathbf{q},\alpha}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{q},\alpha}}{2} \quad (133)$$

が導かれる。これら2つの式から $c_1^{-+} - c_1^{--}$ を消去することで相関関数 $c_1^{-+} + c_1^{zz}$ に対する表式を得る。

次に、演算子 h_i に関するグリーン関数を

$$g_{ij}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle \{h_i(t), h_j^\dagger(t')\} \rangle \quad (134)$$

で定義すると、 H_h^{MF} よりただちに

$$g_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu)}, \quad (135)$$

を得る。ただし $\varepsilon_{\mathbf{q}} = zt^{\text{eff}}\gamma_{\mathbf{q}}$ である。よってスペクトル定理より

$$\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left[1 - \tanh \frac{\beta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu)}{2} \right], \quad (136)$$

$$\phi_1 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} \left[1 - \tanh \frac{\beta(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu)}{2} \right] \quad (137)$$

が導かれる。

連立方程式 (129), (130), (132), (133), (136), (137) を自己無撞着に解くことで、我々は磁化 m のドーピング量依存性を計算できる。図9に、 $T = 0$ での副格子磁化 m のドーピング量依存性を示す。副格子磁化はドーピング量 δ が増加するにつれて減少していき、ある値 δ_c で消失することが見て取れる。 δ_c の値は、例えば $t/J = 2.5$ のとき $\delta_c \approx 0.12$ である。これはドーピングされた正孔が反強磁性秩序を“かき乱し”、やがて破壊することを示している。よって、飛び移り積分 t の値が J に比べて大きいほど、秩序が消失するまでのドーピング量 δ_c は小さくなる。我々の結果は文献 [66–71] などの数値計算の結果と非常に近い値である。(例えば、文献 [66] では $t/J = 2.5$ のとき $\delta_c \approx 0.13$ という値が得られている。) 一方、通常のスレーブボソン平均場法 [9–12] は、一般に反強磁性秩序を過大評価してしまうため、ハーフフィリング近傍の磁性の議論には適していないと考

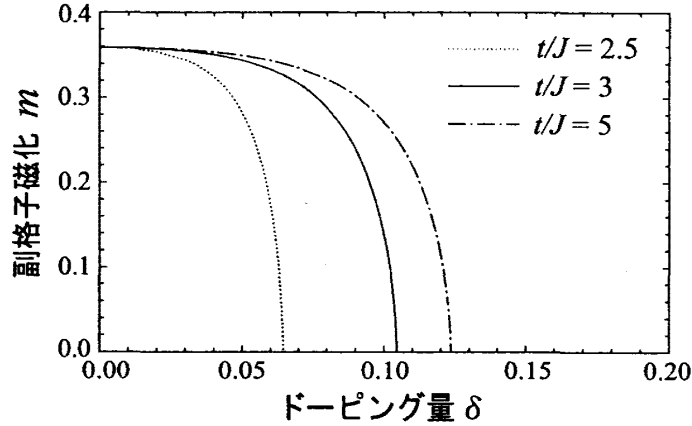


図 9: $T = 0$ における副格子磁化 m のドーピング量依存性.

えられる。(例えば、文献 [11] に見られるように $t/J = 4.0$ でさえ δ_c の値は 0.15 を超えてしまい、また、ハーフフィリングでの副格子磁化の値も $T = 0$ で $1/2$ になってしまう。) t - J 模型の擬スピン表示では、平均場近似を行った後でさえハーフフィリング ($\delta = 0$) で反強磁性ハイゼンベルグハミルトニアンに帰着するため、 $T = 0$ でも量子揺らぎの効果により副格子磁化が最大値 $1/2$ より小さい値に抑制される。我々の結果と数値計算のものを比較すると、 δ_c の値はとかなり近い値になるが、副格子磁化の値に関しては数値計算のものの方がドーピング量 δ に対してより鋭く減少していく傾向にある。これは我々の用いた平均場近似、もしくは RPA 切断の方法に起因するものと考えられる。³² また、銅酸化物超伝導体における δ_c の実験値は、もちろん物質によって異なるが、概ねここで得たような理論値よりも小さい値である。これはそもそもの模型自体の問題であり、より定量的な比較のためには次近接ホッピングの項などをハミルトニアンに加える必要がある。(そうすることで電子ドープ系と正孔ドープ系の相図の非対称性なども再現できると期待される。)

6 おわりに

本研究では、主に量子スピン系の解析的手法の一つ、グリーン関数法における切断近似に関して再検討し、また、その方法の複雑な系への適用に関して議論した。さらに、高温超伝導体の物性を記述する標準的な模型の一つである t - J 模型を、スピンレスフェルミオンとスピン- $1/2$ 演算子を用いて変換 (擬スピン表示) し、その反強磁性秩序に関してグリーン関数法を用いて考察した。

まず、第 2 章で我々はフェルミ演算子に対する擬スピン表示を導入し、通常は“拘束された”電子演算子 $\tilde{c}_{i\sigma} = (1 - c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\sigma}) c_{i\sigma}$ を用いて表現される t - J 模型を、2 つの補助場 h_i と S_i を用いた表示に書き換えた。このとき h_i^\dagger は (ドープされた正孔によってできる) “空” の状態をつくる生成演算子である。一方、 S_i は、サイト i に電子がいるとき ($h_i^\dagger h_i = 0$) は実スピンの状態 (物理的な電子のスピン状態) を表し、電子が占有していない ($h_i^\dagger h_i = 1$) ときは擬スピンの状態を表す。この空のサイトに付与された擬スピンの方向は、パラメータ θ_i, φ_i を通して任意に選べ、計算される物理量には影響を与えない。この擬スピン表示の t - J 模型は、外部の拘束条件を必要としない厳密な変換になっている。

第 3 章では、量子スピン系の物理を解析するための道具として、グリーン関数に対する運動方

³² ハミルトニアンを擬スピン表示で書くこと自体は厳密な変換なので、その後行なった近似に起因するはずである。

程式を用いる方法を議論した。基本となるグリーン関数の時間発展を考えると、通常は、より高次のグリーン関数が運動方程式の中に含まれる。さらにその高次グリーン関数に対しての時間発展を考えるということを繰り返していくと、無限の階層構造を持つ連立運動方程式になる。いくつかの場合、例えばハミルトニアンがもともと対角的である場合や系が有限のサイズのとき³³などでは階層構造が途中で閉じて、グリーン関数に対する厳密な解が得られる。我々は、厳密に解くことができる場合の一つ、 d 次元超立方格子上のスピン-1/2 イジング模型に対してグリーン関数法の適用を実演した。より一般的な場合、例えばスピンスリップ (XY) 項が加わる場合は、連立運動方程式が閉じずに無限構造になってしまう。この場合は方程式を閉じるために何らかの近似が必要となる。我々は最もシンプルかつ有用な方法として、乱雑位相近似 (RPA) または “Tyablikov decoupling” と呼ばれる切断近似に焦点を当て、平均場近似 (MFT) により得られる結果と比較した。MFT ではスピンスリップ項が無視されてしまうのに対し、RPA の方法ではこの効果が取り入れられるため、得られる結果は量子モンテカルロ法 (QMC) の数値解と広い温度領域で良い一致を示す。この方法は、スピン波近似などの他の方法に比べ、磁化が小さくなる領域でもある程度適用できることが魅力である。さらに $S > 1/2$ で単一イオンの異方性がある場合への拡張についても議論した。

第4章では、より複雑な系、横磁場中の容易軸異方性を持つ反強磁性体及び面内磁場中の容易面異方性を持つ強磁性体に対して RPA 切断の方法を適用した。これらの系では、磁化の方向に垂直な面内で交換相互作用に異方性があるため、スピン揺らぎが (楕円型的に) 異方的になる。第4.2節で詳しく述べているが、このような場合に RPA 切断の方法を用いる際は注意が必要である。スピン演算子は、その性質から交換関係以外にいくつかの関係式を満たす。しかし、RPA の枠組みの中でそれらすべてを満たすように要求すると、両立しない2つの式が導かれてしまう。そこで、我々はそれらの関係式の中でも、どれを特に要求しなければならないかを議論し、手法を改良することで物理的に妥当な結果を得た。これは我々の方法が異方性の効果を正しく取り入れていることを示しており、QMC の結果とも整合した。しかしながら第4.2節で取り扱った系は比較的シンプルであり、より興味深い他の系、例えば第4.1節のスピン再配向の問題や文献 [42–46] などの多重臨界点の問題への適用に関しては、未だ議論が充分ではない。我々が本研究で示した結果は、これらの系の解析的取り扱いを考える上で大きな助けになるだろう。

第5章では、再び t - J 模型の議論に戻り、第2章で導入した擬スピン表示と第3, 4章で考察したグリーン関数法を用いて反強磁性秩序の秩序変数である副格子磁化を計算した。十分に定量的ではないが最も基本的な近似である平均場近似を用いてハミルトニアンを演算子 h_i で構成される部分と S_i の部分に分割すると、それぞれ実効的な各パラメータを持つ、自由フェルミオン系と横磁場中反強磁性ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンになる。特に後者の実効的な横磁場は、ドーピングされた正孔の動きが反強磁性秩序を “かき乱す” 効果に対応している。それぞれのハミルトニアンに対してグリーン関数を求め、副格子磁化のドーピング量依存性を求めたところ数値計算、実験値と整合する結果を得た。特に、副格子磁化が消失するドーピング量 δ_c に関しては数値計算によって与えられる結果と非常に近い値を得た。しかしながら中間領域 $0 < \delta < \delta_c$ での振る舞いは数値計算のそれと異なる。これは我々の用いた RPA の方法に問題がある可能性が高い。この点は第4.1節の系に対する解析的な手法の発展を待つ必要がある [73]。擬スピン表示を用いた我々の方法は、例えば平均場近似を用いてハミルトニアンを分割した後でも、ハーフフィリング ($\delta = 0$) で反強磁性ハイゼンベルグ模型に帰着するという性質を保っている。したがって他の典型的な平均場理論に比べハーフフィリング近傍の、特に磁性の議論に適していると考えられる。

³³ただし、サイズが大きくなるほど連立方程式を構成する式の数が増える。文献 [72] にある 2 サイトハバード模型及び t - J 模型の解法が参考になる。

本研究では、擬スピン表示の t - J 模型を平均場近似とスピングリーン関数に対する RPA 切断の方法を用いて解析した。しかしながらこれらの方法にはまだまだ多くの課題が残っている。RPA 切断の方法一つを取ってみても第 4 章で述べたような問題が残っており、そもそも Tyablikov の論文 [21] の発表から 50 年程たった現在でも、RPA を超えるより定量的な切断近似に関しては十分に確立した方法は現れていない。グリーン関数の運動方程式を用いた近似法は、量子スピン系に限らず様々な系³⁴に対して適用され、現在もその改良に関して多くの研究が報告されている。本研究の成果がそれらの研究の発展のための一助となれば幸いである。

謝辞

本研究を進める上で、終始懇切なる御指導と親身な御助言を頂きました栗原 進 教授に深謝いたします。先生には、研究を始めたばかりで右も左も分からないころから、私の指導教官として様々な場面で大変御世話になりました。藤堂 眞治 講師には共同研究者として QMC の数値計算をはじめ、大変有益な御助言を賜りました。本研究の第 4.2 節の議論に関しましては、先生の御協力がなければ今の形で完成してはいませんでした。また、栗原研究室の皆様とは日頃から様々な議論をさせて頂き感謝しています。特に上出 健仁 助教、余越 伸彦 助手、段下 一平 博士には、良き先輩として私を導き、励ましてくださったことに心から感謝いたしております。最後になりましたが、学会や夏の学校にて議論をしてくださった皆様に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] P. A. Lee, N. Nagaosa, X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
- [2] H. Mukuda, M. Abe, Y. Araki, Y. Kitaoka, K. Tokiwa, T. Watanabe, A. Iyo, H. Kito, and Y. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **96**, 087001 (2006).
- [3] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, R3759 (1988); **41**, 7243 (1990).
- [4] J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, Phys. Rev. B **45**, 7959 (1992).
- [5] M. Ogata and H. Fukuyama, Rep. Prog. Phys. **71**, 036501 (2008) and references therein.
- [6] G. Kotliar and J. Liu, Phys. Rev. B **38**, 5142 (1988).
- [7] T. Tanamoto, H. Kohno and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 717 (1993).
- [8] X.-G. Wen and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **76**, 503 (1996).
- [9] M. Inui, S. Doniach, P. J. Hirschfeld, and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. B **37**, 2320 (1988).
- [10] C. L. Kane, P. A. Lee, T. K. Ng, B. Chakraborty, and N. Read, Phys. Rev. B **41**, 2653 (1990).
- [11] H. Matsukawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1882 (1992).
- [12] M. Inaba, H. Matsukawa, M. Saitoh, and H. Fukuyama, Physica C **257**, 299 (1996).

³⁴例えば文献 [74] など。

- [13] G. Khaliullin and P. Horsch, Phys. Rev. B **47**, 463 (1993).
- [14] J. L. Richard and V. Yu. Yushankhaï, Phys. Rev. B **47**, 1103 (1993).
- [15] Y. R. Wang and M. J. Rice, Phys. Rev. B **49**, 4360 (1994).
- [16] J. Loos, Phys. Rev. B **53**, 12556 (1996).
- [17] S. Östlund and M. Granath Phys. Rev. Lett. **96**, 066404 (2006).
- [18] D. Yamamoto and S. Kurihara, Phys. Rev. B **75**, 134520 (2007).
- [19] D. Yamamoto and S. Kurihara, Physica B **403**, 1112 (2008).
- [20] S. Feng, Z. B. Su, and L. Yu, Phys. Rev. B **49**, 2368 (1994).
- [21] S. V. Tyablikov, Ukr. Mat. Zh. **11**, 289 (1959); S. V. Tyablikov, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (Plenum Press, New York, 1967).
- [22] H. B. Callen, Phys. Rev. **130**, 890 (1963).
- [23] R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **132**, 689 (1963).
- [24] J. A. Copeland and H. A. Gersch, Phys. Rev. **143**, 236 (1966).
- [25] R. H. Swendsen, Phys. Rev. B **5**, 116 (1972).
- [26] A. Oguchi, Prog. Theor. Phys. **46**, 63 (1971).
- [27] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, Phys. Rep. **432**, 223 (2006).
- [28] J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
- [29] H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
- [30] I. Junger, D. Ihle, J. Richter, and A. Klümper, Phys. Rev. B **70**, 104419 (2004).
- [31] T. N. Antsygina, M. I. Poltavskaya, I. I. Poltavsky, and K. A. Chishko, Phys. Rev. B **77**, 024407 (2008).
- [32] P. E. Bloomfield and N. Nafari, Phys. Rev. A **5**, 806 (1972).
- [33] F. Mancini, Eur. Phys. J. B **45**, 497 (2005).
- [34] C. Timm, S. M. Girvin, P. Henelius, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **58**, 1464 (1998).
- [35] <http://wistaria.comp-phys.org/alps-looper/>.
- [36] S. Todo and K. Kato, Phys. Rev. Lett. **87**, 047203 (2001).
- [37] A.F. Albuquerque *et al.*, J. Mag. Mag. Mat. **310**, 1187 (2007).
- [38] D. Yamamoto, S. Todo, and S. Kurihara, Phys. Rev. B **78**, 024440 (2008).
- [39] F. B. Anderson and H. B. Callen, Phys. Rev. **136**, A1068 (1964).

- [40] P. Henelius, P. Fröbrich, P. J. Kuntz, C. Timm, and P. J. Jensen, Phys. Rev. B **66**, 094407 (2002).
- [41] M. Tanaka and Y. Kondo, Prog. Theor. Phys. **48**, 1815 (1972).
- [42] M. E. Fisher and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **32**, 1350 (1974).
- [43] H. Rohrer, Phys. Rev. Lett. **34**, 1638 (1975).
- [44] D. P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. B **24**, 1391 (1981).
- [45] K. Ohgushi and Y. Ueda, Phys. Rev. Lett. **95**, 217202 (2005).
- [46] M. Holtschneider, W. Selke, and R. Leidl, Phys. Rev. B **72**, 064443 (2005); M. Holtschneider, S. Wessel, and W. Selke, *ibid.* **75**, 224417 (2007).
- [47] Y. G. Rudoi and Y. A. Tserkovnikov, Teor. Math. Phys. **25**, 1073 (1975).
- [48] E. B. Brown, Phys. Rev. B **36**, 266 (1987).
- [49] P. Fröbrich, P. J. Jensen, and P. J. Kuntz, Eur. Phys. J. B **13**, 477 (2000).
- [50] P. Fröbrich, P. J. Jensen, P. J. Kuntz, and A. Ecker, Eur. Phys. J. B **18**, 579 (2000).
- [51] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, Eur. Phys. J. B **32**, 445 (2003).
- [52] P. J. Jensen, S. Knappmann, W. Wulfhekel, and H. P. Oepen, Phys. Rev. B **67**, 184417 (2003).
- [53] H.-Y. Wang, C.-Y. Wang, and E.-G. Wang, Phys. Rev. B **69**, 174431 (2004).
- [54] J.-S. Caux, F. H. L. Essler, and U. Löw, Phys. Rev. B **68**, 134431 (2003).
- [55] D. V. Dmitriev and V. Ya. Krivnov, Phys. Rev. B **70**, 144414 (2004).
- [56] S. Schwieger, J. Kienert, and W. Nolting, Phys. Rev. B **71**, 024428 (2005).
- [57] M. G. Pini, P. Politi, and R. L. Stamps, Phys. Rev. B **72**, 014454 (2005); S. Tacchi, A. Stollo, M. Madami, G. Gubbiotti, G. Carlotti, M. G. Pini, P. Politi, and R. L. Stamps, Surface Science **600**, 4147 (2006).
- [58] P. J. Jensen, K. H. Bennemann, D. K. Morr, and H. Dreysse, Phys. Rev. B **73**, 144405 (2006).
- [59] T. Tamaribuchi and M. Ishikawa, Phys. Rev. B **43**, 1283 (1991).
- [60] M. E. Zhitomirsky and T. Nikuni, Phys. Rev. B **57**, 5013 (1998).
- [61] A. Cuccoli, T. Roscilde, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verrucchi, Phys. Rev. B **67**, 104414 (2003).
- [62] M. E. Zhitomirsky and A. L. Chernyshev, Phys. Rev. Lett. **82**, 4536 (1999).

- [63] D. Petitgrand, S. V. Maleyev, Ph. Bourges, and A. S. Ivanov, Phys. Rev. B **59**, 1079 (1999).
- [64] 具体的に言うと, 例えば式 (100) は, 文献 [51] 中の式 (28) と $H_x \rightarrow \tilde{\Gamma}_q, \tilde{H}_x \rightarrow \Gamma_q, H_z \rightarrow 0$ という対応で一致する.
- [65] T. Aoki, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 2909 (1992).
- [66] M. Calandra and S. Sorella, Phys. Rev. B **61**, R11894 (2000).
- [67] T. K. Lee and Shiping Feng, Phys. Rev. B **38**, 11809 (1988).
- [68] T. Giamarchi and C. Lhuillier, Phys. Rev. B **43**, 12943 (1991).
- [69] A. Himeda and M. Ogata, Phys. Rev. B **60**, R9935 (1999).
- [70] M. Ogata and A. Himeda, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 374 (2003).
- [71] D. A. Ivanov, Phys. Rev. B **70**, 104503 (2004).
- [72] A. Avella, F. Mancini, and T. Saikawa, Eur. Phys. J. B **36**, 445 (2003).
- [73] $\delta \geq \delta_c$ では, (実スピン磁化 m が 0 になり) $|\langle \mathbf{S}_i \rangle|$ の方向が完全に実効的な磁場 h^{eff} の方向を向くため, $|\langle \mathbf{S}_i \rangle|$ の方向を中心として系が等方的になる. よって少なくともこの領域では, 通常のグリーン関数の組を用いた単純な RPA の方法でも良い結果が得られているはずである. このことが δ_c に対して非常に良い値が得られる理由かもしれない.
- [74] F. Mancini and A. Avella, Adv. Phys. **53**, 537 (2004).